

定常爆轰数值模拟中人为粘性 与人为反应率的选取

朱建士 魏振典 周德忠

(1982年8月10日收到)

稳定爆轰波数值模拟时,常引入人工粘性和点火函数。文中讨论了由于加入人工粘性和点火函数引起的爆轰波结构问题。计算了几种爆轰波的结构作为例子。

在用计算机模拟爆轰波的一维计算程序中处理的是理想流体一维不定常流问题。它所用的爆轰波理论模型是所谓的 Chapman -- Jouguet (CJ) 模型,即假定爆轰波是一个包含化学反应的强间断面,反应是在一个极薄(因而厚度可以忽略不计)的区域内完成的,因此,本来是不存在反应区的结构问题的。在编制程序时,由于需要,引进了 Von Neumann 人为粘性,使间断面光滑成一个过渡区,同时也就引进了一个人为的起爆函数¹,化学反应释放的能量按一定的规律逐步释放,实质上引进了一个人为的化学反应率。这样一来,虽然在编制程序以前的理论模型中不存在反应区,但在计算程序中存在反应区的一维结构问题,程序在一定条件下是可以计算出各种不同的一维反应区结构来的。本文从理论上讨论有人为粘性、有一定化学反应率的假想炸药的反应区一维定常结构。

一、方 程

程序中的基本方程,对一维平面问题是

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial R}{\partial t} = u \\ \frac{\partial u}{\partial t} = - \frac{\partial(p+q)}{\rho_0 \partial r} \\ \frac{v}{\tau_0} = \frac{\partial R}{\partial r} \\ \frac{\partial e}{\partial t} + (p+q) \frac{\partial v}{\partial t} = 0 \end{array} \right. \quad (1)$$

其中 R 是欧拉坐标, r 是拉格朗日坐标, u 是质点速度, p 是压力, e 是比内能, v 是比容, q 是人为粘性项。

$$q = \left(\frac{l^2}{2v} \frac{\partial u}{\partial r} \left(\frac{\partial u}{\partial r} - \left| \frac{\partial u}{\partial r} \right| \right) \right)$$

它可以写成

$$q = \begin{cases} \frac{l^2}{v} \left(\frac{\partial u}{\partial r} \right)^2 & \text{当 } \frac{\partial u}{\partial r} < 0 \\ 0 & \text{当 } \frac{\partial u}{\partial r} > 0 \end{cases} \quad (2)$$

所用状态方程为

$$p = (k - v) \rho \delta e \quad (3)$$

其中 δ 为

$$\delta = \begin{cases} 0 & \text{固体炸药} \\ \alpha D_j \frac{l - r}{\Delta R} & \text{过渡区} \\ 1 & \text{爆轰产物} \end{cases} \quad (4)$$

这里的 δ 实际上就是反应区的化学进展度, 由 (4) 看出, 反应率是 $\frac{d\delta}{dt} \cong \frac{\alpha D_j}{\Delta R}$ 。其中 α 是适当选取的常数, D_j 为 C—J 爆速, ΔR 是分点的大小。

我们可以将方程写到欧拉坐标上。

当爆轰波离起爆点足够远时, 可以近似看成定常的, 这样方程变为

$$\begin{cases} u \frac{\partial \rho}{\partial R} + \rho \frac{\partial u}{\partial R} = 0 \\ u \frac{\partial e}{\partial R} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial (p+q)}{\partial R} \\ u \frac{\partial e}{\partial R} + (p+q) u \frac{\partial v}{\partial R} = 0 \end{cases} \quad (5)$$

积分 (5) 式, 得到

$$\begin{cases} \rho u = \rho_0 u_0 \\ p + q + \rho u^2 = p_0 + \rho_0 u_0^2 \\ e + (p+q)v + u^2/2 = p_0 v_0 + e_0 + u_0^2/2 \end{cases} \quad (6)$$

人为粘性项 (2) 写到欧拉坐标为

$$q = \begin{cases} 0 & \text{当 } \frac{du}{dR} > 0 \\ \frac{l^2 v}{v_0^2} \left(\frac{du}{dR} \right)^2 & \text{当 } \frac{du}{dR} < 0 \end{cases} \quad (7)$$

由(6)式中第一式有

$$\frac{u}{u_c} = \frac{\rho_0}{\rho} = \frac{v}{v_c} = \phi \quad (8)$$

ϕ 为无量纲量, 是无量纲速度或无量纲比容。当忽略波前的压力 p_3 时, (6) 式第二、第三两式写成

$$q = -p + \rho_0 u^2 (1 - \phi) \quad (9)$$

$$q = \frac{\rho_0}{\phi} (e_0 - e) - p + \frac{\rho_0 u_0^2}{2\phi} (1 - \phi^2) \quad (10)$$

(9), (10) 两式相等, 得到

$$e = e_0 + \frac{u_0^2}{2} (1 - \phi)^2 \quad (11)$$

由状态方程(3)及(11)式, (9)式可写成

$$q = \rho_0 D^2 \left\{ (1 - \phi) - \frac{\delta}{\phi} \left[\frac{\xi^2}{2(k+1)} + \frac{k-1}{2} (1 - \phi)^2 \right] \right\} \quad (12)$$

其中 $D = u_c$, $\xi = D_I/D$, $e_0 = D_I^2/2(k^2 - 1)$

由(2)式, 当 $\frac{du}{dR} < 0$ 时有

$$q = \frac{l^2 v}{v_c^2} \left(\frac{du}{dR} \right)^2 = \frac{l^2 v}{v_c^2} \left(\frac{du}{d\delta} \cdot \frac{d\delta}{dR} \right)^2 = \frac{l^2 v}{v_c^2 \phi^2} \left(\frac{d\phi}{d\delta} \cdot \frac{d\delta}{dR} \right)^2$$

由(4)式有

$$q = \frac{l^2 v}{v_c^2 \phi^2} \left(\frac{\alpha D_I}{dR} \right)^2 \left(\frac{d\phi}{d\delta} \right)^2 \quad (13)$$

考虑到 $l = \alpha \Delta r = \alpha \frac{v}{v_c} \Delta R$, 将(13)代入(12), 就得到含 ϕ, δ 两个变量的常微分方程

$$\frac{d\phi}{d\delta} = - \frac{\phi}{\alpha \xi} \sqrt{(1 - \phi)\phi - \delta \left[\frac{\xi^2}{2(k+1)} + \frac{k-1}{2} (1 - \phi)^2 \right]} \quad (14)$$

$\left(\frac{d\phi}{d\delta} \right)^2$ 开方时取负号, 这是因为只有当 $\frac{du}{dR} < 0$, 即 $\left(\frac{d\phi}{d\delta} \right) < 0$ 时公式(14)才有意义。

当 $\frac{d\phi}{d\delta} > 0$ 时, 由人为粘性项的定义, $q = 0$, 即

$$(1 - \phi) - \frac{\delta}{\phi} \left[\frac{\xi^2}{2(k+1)} + \frac{k-1}{2} (1 - \phi)^2 \right] = 0$$

即

$$\delta = \frac{2(k+1)(1-\phi)\phi}{\xi^2 + (k^2-1)(1-\phi)^2} \quad (15)$$

这相当于 (δ, ϕ) 平面内的 Rayleigh 线。

为了以后讨论方便, 在这里将 (δ, ϕ) 平面和人们常用的 (p, v) 平面的对应关系叙述如下:

(p, v) 平面上的 Hugoniot 曲线对应 (δ, ϕ) 平面上的 $\delta = 1$ 直线, 即反应完毕的曲线。 (p, v) 平面上的 Rayleigh 直线, 对应公式 (15) 描写的曲线, 我们称为 (δ, ϕ) 平面上的 Rayleigh 线。当 $D = D_c$ 时, Rayleigh 线与 $\delta = 1$ 线相切, 切点对应 C—J 爆轰。当 $D < D_c$ 时, ($\xi < 1$) Rayleigh 线与 $\delta = 1$ 线交于两点 S 和 W, 分别对应于强爆轰和弱爆轰。

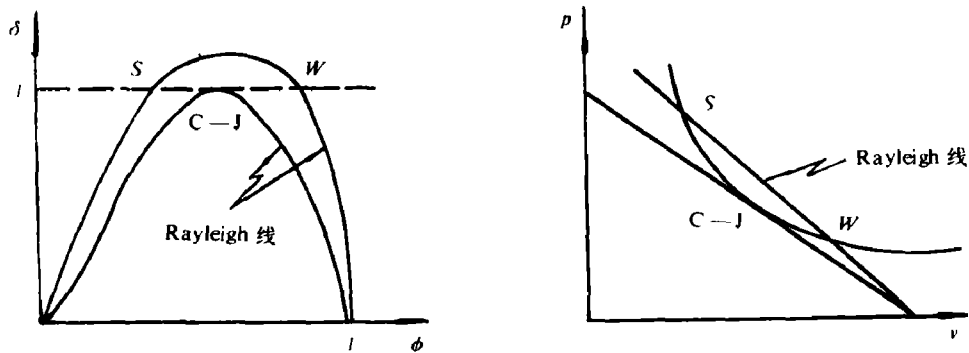


图 1

二、积分曲线的定性分析

方程 (14) 是包含两个参数的常微分方程, 参数 $a\alpha$ 与人为粘性系数和反应率有关, 另一个参数 $\xi = D_1/D$ 是相对爆速。这里先对积分曲线进行定性分析。

当 $\xi = 1$, 即 $D = D_c$ 时, 在平面 (δ, ϕ) 上有图 2。Rayleigh 线与 $\delta = 1$ 线相切。先定出方程 (14) 的积分曲线的起点, 由程序规定, 公式 (4) 中的 τ 是某一网格点达到 $\sigma = \sigma_c$ 的时刻, σ 是 ϕ 的倒数, 即反应开始时应有 $\sigma = \sigma_c$, 所以积分曲线起点应在 $\delta = 0, \phi = \phi_c = 1/\sigma_c$ 上。我们取 $\sigma_c = 1.03$, 所以 $\phi_c = 0.97$ 。从 (14) 式看出, 当 $\xi = 1$ 取定后, 积分曲线是以 $a\alpha$ 为参数的曲线族。 $a\alpha$ 越小, 曲线越偏左边; $a\alpha$ 越大, 曲线越偏右边。当 $a\alpha$ 值较小时, 积分曲线将在 C—J 点的左边与 Rayleigh 线相交 (如图 2 曲线 a)。这时 $q = 0$, Rayleigh 线上方程 (14) 无意义, 积分曲线应按方程 (15) 移动, 即沿 Rayleigh 线移动。因为 δ 总是增加的, 故一定沿 Rayleigh 线 (见图 2) 向上达到 CJ 点, 反应区的 (p, v) 图见图 3, 可以看到这时将出现类似 Von—Neumann 尖点的压力峰值, 计算出的反应区内压力将大于 C—J 爆压, 因为反应区内的状态方程和反应率都是假设的, 这并不是真实的 Von Neumann 尖点。但反应区终态是 CJ 点。

当 $a\alpha$ 值增大时, 有一个值 $[a\alpha]$, 它使积分曲线交 Rayleigh 线于 CJ 点, 这时反应区内压力、速度和密度等参数是连续单调过渡到 CJ 点, 当我们对爆轰波内部结构不感兴趣时, 采取这种过渡模拟爆轰波比较简单 (图 2、3 中以 b 代表这种情况)。

当 $a\alpha$ 进一步增大, 积分曲线 c 在 CJ 点的右边与 Rayleigh 线相交。相交后也应沿 Rayleigh 线移动, 但是 δ 继续向 1 过渡, 曲线向上过渡到 CJ 点。这时 ϕ 将减少, 即有 $du/dR < 0$ 。根据粘性项的定义, 粘性项又要起作用, 这与前提条件矛盾。可见当 $a\alpha > [a\alpha]$ 时, 对 $\xi = 1$ 没有定常解, 即对这种 $a\alpha$ 值, 不会有爆速为 D_c 的爆轰波解。但是存在一个 $\xi^* > 1$, 使积分曲线正好交于它所对应的弱爆轰点 W 上 (图 2 的虚线)。可见 $[a\alpha]$ 是一个临界值,

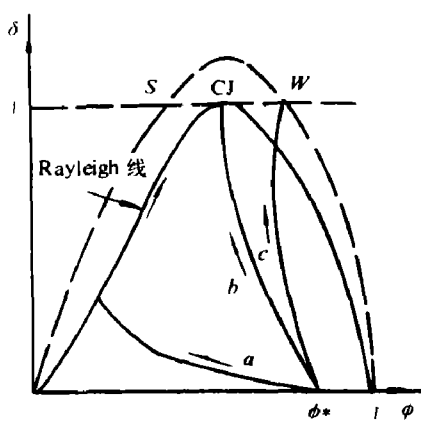


图 2

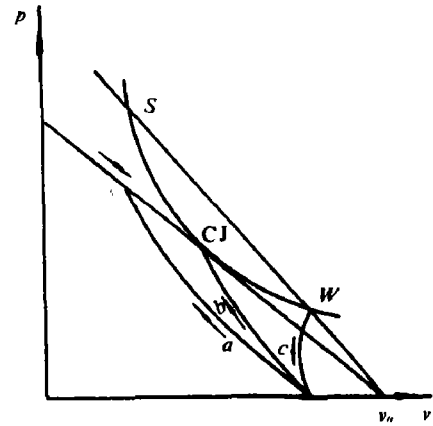


图 3

当 $a\alpha < [a\alpha]$ 时,总是出现CJ爆轰(当爆轰波后没有很强的活塞时)。 $a\alpha < [a\alpha]$ 将出现人为的压力峰值; $a\alpha = [a\alpha]$ 没有压力峰值; $a\alpha > [a\alpha]$, 将出现弱爆轰解。这种弱爆轰解完全是算出来的,并不是真实存在的,因此在进行模拟爆轰波的数值计算时,最好取 $a\alpha = [a\alpha]$ 。

三、计算结果

1、 $[a\alpha]$ 的确定。方程 (14) 解析求解有困难,但用数值求解还是比较简单的。对 9404 取 $\rho_c = 1.835g/cm^3$, $k = 3.07$, $D_1 = 8.806mm/\mu s$, 取不同的 $a\alpha$ 值计算积分曲线,发现 $a\alpha = [a\alpha] \cong 0.75$ 时积分曲线与 Rayleigh 线交于 CJ 点附近。当 $a = 3$ 时, $\alpha = 0.25$, 这与通过程序计算的程序得到的结果是一致的。另外也看到, α 的选取与 a 的选取有关,必须满足 $a\alpha \cong 0.75$ 。 a 变化时, α 也要变化。

2、用程序计算了一个活塞问题。设波前状态 $p = 0$, $u = 0$, 活塞速度 $u_p = u_1$ 。从爆轰波的 CJ 理论看,爆轰波应是 CJ 爆轰,爆轰波和活塞之间应是常数区, $\rho = \rho_1$, $p = p_1$, $u = u_1$ 。

由于程序里有人为粘性及反应率,问题就较为复杂。 $a\alpha < [a\alpha]$ 时,反应区积分曲线为图 2 中 (a), 压力有峰值见图 4 (a); 当 $a\alpha = [a\alpha]$ 时,反应区积分曲线为图 2 中 (b), 压力分布是图 4 (b) 中的情形; 当 $a\alpha > [a\alpha]$ 时,将出现弱爆轰,爆速 $D > D_1$ 波后压力为对应的弱爆轰压力,小于 p_1 。为了和活塞条件匹配,在弱爆轰波和活塞之间有一压缩波。由于压缩波相对波前是声速,而弱爆轰相对波前是超声速,压缩波赶不上弱爆轰波。

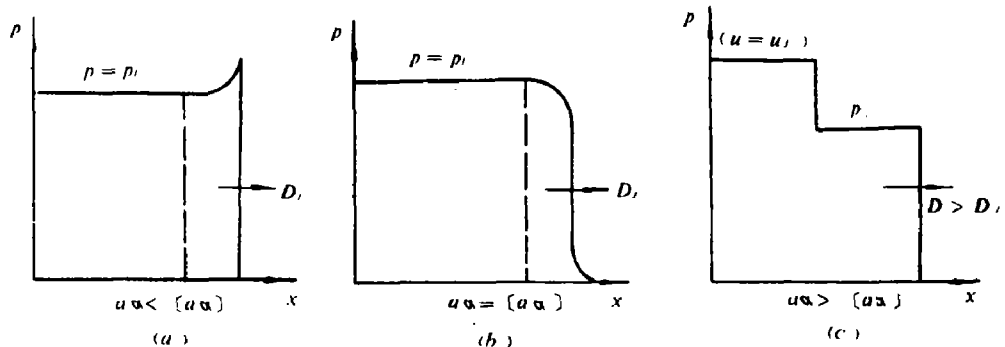


图 4

用程序计算了 $ua = 0.15, 0.75, 1.5$ 三种情形, 计算出的压力分布与图 4 所示的一致, 特别是当 $ua = 1.5$ 时, 爆速大于 CJ 爆速, 出现两个压力均匀区, 它们之间由一压缩波联系, 完全是弱爆轰的物理图象。

计算中常用到另一种形式的起爆函数, 即反应率

$$\delta = \begin{cases} 0 & \text{固体炸药} \\ \left[\frac{(\rho - \rho_0)\rho_f}{(\rho_f - \rho_0)\rho} \right]^m & \text{过渡区} \\ 1 & \text{爆轰产物} \end{cases} \quad (16)$$

根据 (8) 式化成无量纲形式

$$\delta = \begin{cases} 0 & \text{固体炸药} \\ \left(\frac{1 - \phi}{1 - \phi_f} \right)^m & \text{过渡区} \\ 1 & \text{爆轰产物} \end{cases} \quad (17)$$

对这种起爆函数, 在 (δ, ϕ) 平面上就没有多条积分曲线, 而只有一条由 (17) 式描述的曲线 a (见图 5)。表面看来公式 (17) 保证了反应区一定是从初始态 ($\delta = 0, \phi = 1$) 达到 CJ 态 ($\delta = 1, \phi = \phi_f$)。但是由于我们经常遇到的是爆轰波后为自由面条件, 在超爆过程中就达不到 ϕ_f , 因为达不到 ϕ_f , 这意味反应不能完成, $\delta < 1$, 计算结果很可能是算出一个放能较少的爆轰波。有时, 当达不到 ϕ_f 时, 人为将 δ 取成 1, 这就等于从 $\phi = 1$ 点开始沿曲线走到 ϕ^* 处突然沿虚线走到 $\delta = 1$ 直线上 (见图 5), 这个点当然对应某一定爆速的弱爆轰。因此, 用 (16) 式的起爆函数, 同样可能算出弱爆轰解来。

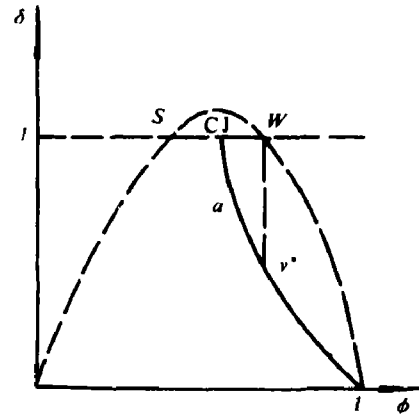


图 5

参 考 文 献

- [1] Wilkins, Mark L., "Calcul de Détonations Mono et Bidimensionnelles", Les Ondes de Détonation, Éditions du Centre National de la Recherche Scientifique 15, Quai Anatole-France-Paris (VII^e) (1962).

**ARTIFICIAL VISICOSITY AND RATE OF
REACTION IN NUMERICAL MODELING
OF STEADY DETONATION**

Zhu Jianshi Wei Zhendian Zhou Dezhong

Abstract

In numerical modeling of steady detonation, generally an artificial viscosity and a function of initiation is introduced. The problem of an artificial structure of detonation due to the addition of the artificial viscosity and function of initiation is discussed. Some examples of calculated detonation structures are illustrated.