

# 定常爆轰数值模拟中化学反应率与人为粘性的相关性

刘尔岩

(1984年12月17日收到)

本文给出了用爆速燃烧、Cochran及 Forest Fire 三种不同反应率函数对正常爆轰波进行数值模拟时，分别满足的唯象条件。应用 Cochran 或 Forest Fire 反应率时，适当选取人为粘性，其唯象条件直接给出了数值模拟正常爆轰应使用的空间步长 提供了数值计算结果。

数值模拟定常爆轰传播时，对炸药化学反应区可有不同的唯象处理办法，即可给化学反应进展度（下称化学反应率下）以不同的函数表达式，如体积燃烧函数、爆速燃烧函数、Cochran 反应率及 Forest Fire 反应率等等；而数值模拟急剧变化的过渡区又可引入不同的人为粘性表达式  $q$ 。这样，由于选用的  $F$  及  $q$  的表达式不同，在反应区便可得到不同的图象；即使应用同一组反应率  $F$  及人为粘性  $q$ ，由于计算条件不同（如网格大小不同），可能给出完全不同的数值模拟结果（如 Cochran 及 Forest Fire 二种反应率就是这样）。本文对上述几种反应率分别做了讨论，给出了数值模拟正常爆轰时的唯象条件。

为简化模型，对装药、化学反应区及爆轰产物皆用指数  $k$  不变的多形式的状态方程；粘性  $q$  用 Von Neumann 二次粘性表达式。

设在一平面装药中有一定常爆轰波以常速度  $\vec{D}$  由左向右传播（见图1）。波前状态量以下标“0”记之，波后状态量以下标“2”记之，化学反应过渡区中物理量则不记下标，且取  $P_0 = E_0 = 0$ 。

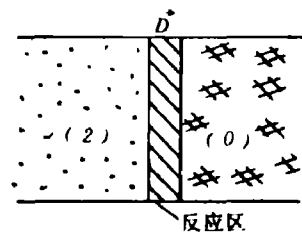


图1

下面对上述几种化学反应率分别讨论。

## 1. 体积燃烧函数

HEMP 程序中引用的体积燃烧函数形式如下：

$$F = \frac{1 - \bar{V}}{1 - \bar{V}_J} \quad (1.1)$$

其中， $F$  是燃烧份数； $\bar{V} = V/V_0$  为无量纲体积； $\bar{V}_J$  为  $CJ$  态无量纲体积。 $\bar{V}_{cJ} = V_{cJ}/V_0 = K/(K+1)$

$$\frac{dF}{dt} = -\frac{1}{(1-\bar{V}_{cJ})} \frac{d\bar{V}}{dt} \quad (1.2)$$

在化学反应区中,  $dF/dt > 0$  且连续, 便可将  $F$  选为拉格朗日自变量:

$$\frac{d\bar{V}}{dt} = \frac{d\bar{V}}{dF} \cdot \frac{dF}{dt} \quad (1.3)$$

(1.2)代入(1.3)有:

$$\frac{d\bar{V}}{dF} = -(1-\bar{V}_{cJ}) = -\frac{1}{K+1} \quad (1.4)$$

由(1.4)可见, 在化学反应区中,  $d\bar{V}/dF$  值只依赖于多方指数  $K$ , 并可在  $\bar{V}-F$  平面上做出  $\bar{V}$  随  $F$  变化规律, 见图 2。这就是说, 无论人为粘性系数选取何值, (1.1)式总能确保在波阵面上, 即反应完毕时, 达到  $CJ$  态体积:  $F = 1, \bar{V} = \bar{V}_{cJ}$ 。

## 2. 爆速燃烧函数与炸药化学能耦合

此时, 化学反应区有下列方程组:

$$\rho_0 D = \rho(D-u) \quad (2.1)$$

$$p+q+\rho(D-u)^2 = \rho_0 D^2 \quad (2.2)$$

$$e+(p+q)V + \frac{(D-u)^2}{2} = \frac{D^2}{2} + FQ \quad (2.3)$$

$$p = (K-1)\rho e \quad (2.4)$$

$$Q = D_j^2/2(K^2-1) \quad (2.5)$$

$$q = \begin{cases} l^2 \rho \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 & \text{当 } \frac{\partial u}{\partial x} < 0 \quad l = a \Delta x \\ 0 & \text{当 } \frac{\partial u}{\partial x} > 0 \end{cases} \quad (2.6)$$

$$F = \begin{cases} 0 & \text{固体炸药} \\ a D_j \frac{t-t_1}{\Delta X} & \text{过渡区} \\ 1 & \text{爆轰产物} \end{cases} \quad (2.7)$$

式中,  $X, t$  是欧拉坐标;  $x, t$  是拉格朗日坐标;  $u, p$  及  $e$  分别是质点速度、压力及内能;  $q$  是人为粘性;  $a, a$  分别可取不同的常数;  $Q$  是爆热;  $D$  是定常爆轰波传播速度;  $D_j$  是正常爆轰传播速度。由(2.2)有

$$p+q = \rho_0 D^2 - \rho(D-u)^2 = \rho_0 D^2(1-\bar{V}) \quad (2.8)$$

将(2.4)、(2.5)及(2.8)代入(2.3)中有

$$\frac{\rho \bar{V}}{(K-1)\rho_0} + D^2 \bar{V}(1-\bar{V}) + \frac{(D-u)^2}{2} = \frac{D^2}{2} + F \frac{D_j^2}{2(K^2-1)} \quad (2.9)$$

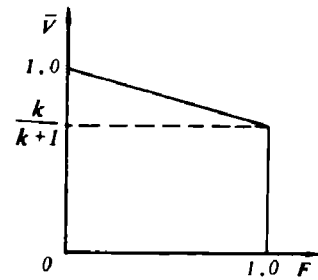


图 2

由(2.9)解出

$$p = \frac{(K-1)\rho_0}{\bar{V}} \left( \frac{D^2}{2} + \frac{FD_j^2}{2(K^2-1)} - D^2\bar{V}(1-\bar{V}) - \frac{(D-u)^2}{2} \right) = \rho_0 D^2 \eta \quad (2.10)$$

$$\eta = \frac{K-1}{2\bar{V}} \left[ (1-\bar{V})^2 + \frac{F\xi^2}{K^2-1} \right], \quad \xi = \frac{D_j}{D}$$

(2.10)代入(2.8)便有

$$q = \rho_0 D^2 (1 - \bar{V} - \eta) \quad (2.11)$$

又知对平面一维问题, 人为粘性  $q$  常用下面表达式:

$$q = \frac{(\rho_0 l)^2}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial t} \right)^2 = \frac{\rho_0 a^2 \Delta X^2}{\bar{V}^3} \left( \frac{d\bar{V}}{dF} \right)^2 \left( \frac{dF}{dt} \right)^2 \quad (2.12)$$

$$l = a \Delta x$$

令(2.11) = (2.12), 有

$$\frac{d\bar{V}}{dF} = - \frac{D\bar{V}[\bar{V}(1-\bar{V}-\eta)]^{1/2}}{a\Delta X(dF/dt)} \quad (2.13)$$

上式右边取负号是因为  $F \uparrow$  时,  $\bar{V} \downarrow$ 。对于将化学能与化学反应率耦合的处理和与 Von Neumann 粘性配合使用这两种情况, (2.13) 式都适用。此公式以后还要多次用到。由 (2.7) 有  $dF/dt = aD_j/\Delta X$ , 代入(2.13) 得到

$$\frac{d\bar{V}}{dF} = - \frac{\bar{V}[\bar{V}(1-\bar{V}-\eta)]^{1/2}}{aa\xi}$$

正常爆轰对应于  $\xi = 1$ , 且令  $aa = \gamma_i$ , 则上式变为

$$\frac{d\bar{V}}{dF} = - \frac{\bar{V}}{\gamma_i} [\bar{V}(1-\bar{V}-\eta)]^{1/2} \quad (2.14)$$

令:  $d\bar{V}/dF = 0$ , 则有

$$1 - \bar{V} - \eta = 0 \quad (2.15)$$

(2.10)代入(2.15)有:

$$p = \rho_0 D^2 (1 - \bar{V}) \quad (2.16)$$

参看(2.11), 可看到(2.15)对应于  $q = 0$  情况; 而公式(2.16)正是  $P-D$  平面上的 Rayleigh 线表达式。所以, 表达式(2.15)给出了  $\bar{V}-F$  平面上的 Rayleigh 线。该曲线亦是以  $\gamma_i$  为参数的满足(2.14)的一族曲线的拐点轨迹<sup>(1)</sup>。在  $\bar{V}-F$  平面上据(2.15)画出 Rayleigh 线  $R$ , 并做出积分曲线族(2.14)(见图3,  $K=3$ ), 从中找出通过  $CJ$  点 ( $F=1, \bar{V}=\bar{V}_{CJ} = K/(K+1)$ ) 的曲线  $S_1$  所对应的  $\gamma_i$  值  $\gamma_{ic}$ ; 当  $\gamma_i < \gamma_{ic}$  时, 其对应的积分曲线  $S_2$  在  $S_1$  下方与  $R$  相交; 当  $\gamma_i > \gamma_{ic}$  时, 积分曲线  $S_3$  在  $S_1$  上方与  $R$  相交。我们知道, 当取  $\gamma_i = \gamma_{ic}$  ( $K=3, \gamma_{ic}=0.7$ ) 时, 化学反应区内压力、速度和密度沿  $S_1$  曲线连续单调地过渡到  $CJ$  点, 此  $\gamma_{ic}$  值即是选用爆速燃烧函数进行数值模拟正常爆轰时所应选用的参数值<sup>(2)</sup>。

### 3. 化学反应区使用 Cochran 反应率

Cochran 化学反应率形式为

$$\frac{dF}{dt} = w_1 p^n (1-F) + w_2 p^m F (1-F) \quad (3.1)$$

$w_1$ 、 $w_2$ 、 $n$ 及 $m$ 皆为常数。此时，化学反应区方程组同(2.1)~(2.6)，只是反应率函数 $F$ 由(3.1)式表示。由(2.13)及(2.10)有：

$$\frac{dV}{dF} = - \frac{D\bar{V}(V(1-\bar{V}-\eta))^{1/2}}{a\Delta X dF/dt} \quad (3.2)$$

$$P = \rho_0 D^2 \eta \quad (3.3)$$

(3.3) 代入 (3.1)：

$$dF/dt = a\eta^n(1-F) + \beta\eta^m F(1-F) \quad (3.4)$$

式中：

$$a = w_1(\rho_0 D^2)^n, \quad \beta = w_2(\rho_0 D^2)^m$$

(3.4) 代入 (3.2)：

$$\frac{dV}{dF} = - \frac{D\bar{V}(V(1-\bar{V}-\eta))^{1/2}}{a\Delta X(a\eta^n(1-F) + \beta\eta^m F(1-F))}$$

正常爆轰对应于  $\xi = 1$ ，且令： $\nu_2 = a\Delta X/D$  代入上式有：

$$\frac{dV}{dF} = - \frac{V(V(1-\bar{V}-\eta))^{1/2}}{\nu_2(a\eta^n(1-F) + \beta\eta^m F(1-F))} \quad (3.5)$$

类似于第二种反应率，在 $\bar{V}-F$ 平面上画出随参量 $\nu_2$ 变化的曲线族(3.5)(见图4)。从图4找出通过 $CJ$ 点的那条积分曲线对应的 $\nu_2$ 值 $\nu_{2c} = 0.68$ (图4用的9404炸药，取 $K=3$ )。当然， $\nu_{2c}$ 值的大小还取决于对应的一组Cochran反应率参数(图4中所用参数参见附录I)。 $\nu_{2c}$ 值确定后，由 $\nu_2$ 定义可得出数值模拟正常爆轰的定常图象所需要的空间步长 $\Delta X$ 。(在选定人为粘性系数 $a$ 及爆轰参数 $D$ 后)。因为 $\nu_2$ 定义中显含空间步长 $\Delta X$ ，所以采用Cochran化学反应率进行数值模拟时，对空间步长的要求是严格的。9404炸药的传播图象随空间步长 $\Delta X$ 的变化参见附录II。

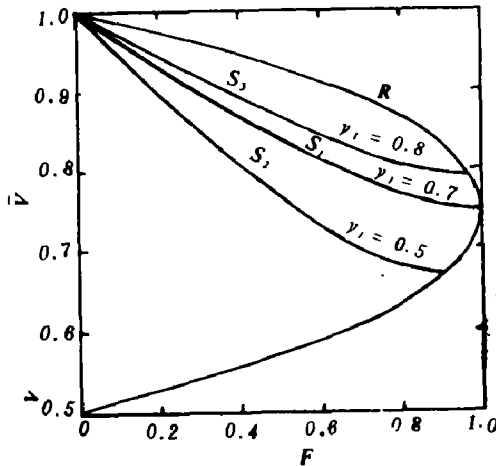


图 3

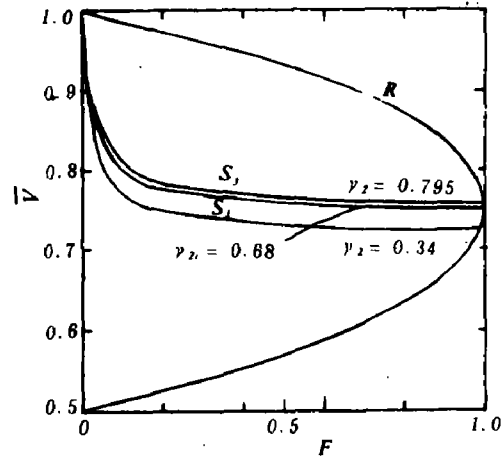


图 4

#### 4. Forest Fire 化学反应率

Forest Fire 化学反应率形式如下：

$$\frac{dF}{dt} = (1-F) \exp\left(\sum_{i=0}^N a_i p^i\right) \quad i = 0, 1, 2, \dots \quad (4.1)$$

$a_i$  为常数。由(2.13)再将(4.1)代入得到

$$\frac{d\bar{V}}{dF} = -\frac{D\bar{V}[\bar{V}(1-\bar{V}-\eta)]^{1/2}}{a\Delta X(1-F)\exp(\sum_{i=0}^N a_i p^i)} \quad (4.2)$$

正常爆轰对应于  $\xi = 1$ , 且令:  $\nu_j = a\Delta X/D$ , 则有

$$\frac{d\bar{V}}{dF} = -\frac{\bar{V}[\bar{V}(1-\bar{V}-\eta)]^{1/2}}{\nu_j(1-F)\exp(\sum_{i=0}^N a_i p^i)} \quad (4.3)$$

与第3种反应率相同, 对9404炸药可在  $\bar{V}-F$  图上找出通过CJ点的积分曲线所对应的  $\nu_j$  值,  $\nu_{j,c} = 0.47$  (见图5)。同理, 因为  $\nu_j$  表达式中显含空间步长  $\Delta X$ , 所以采用Forest Fire化学反应率进行数值模拟时, 对空间步长的要求亦是严格的。

### 5. 讨 论

我们分别导出了在化学反应区中对应于各种不同化学反应率的  $\bar{V}-F$  微分表达式, 又以9404炸药为例在  $\bar{V}-F$  平面上做出了其对应的  $\bar{V}-F$  积分曲线, 从中分别找出了对应各种化学反应率的  $\nu_{j,c}$  值, 当取  $\nu_j = \nu_{j,c}$  时, 化学反应区中各物理量连续单调地过渡到CJ态, 此即为应用上述几种化学反应率数值模拟正常爆轰时的唯象条件 (见表1)。

表1

反 应 率	$\nu_{j,c}$	
	$K = 3$	$K = 2.91$
爆速燃烧函数与Q关联	0.7	0.685
Cochran 反应率	0.68	0.64
Forest Fire 反应率	0.47	0.44

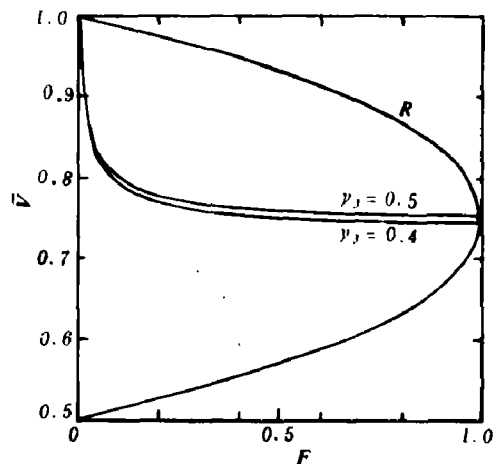


图5

体积起爆函数形式确保了化学反应区中各物理量连续单调地过渡到CJ态亦即不依赖于人为粘性系数和空间步长的选取。正因为如此, 体积燃烧函数是可以和其它任何一种燃烧函数组合使用的 (在爆轰波后是自由面飞散边界条件的问题中, 体积起爆函数又迁到化学反应往往不能充分完成的问题, 见文献[2]), 而其它几种反应率函数就无此长处, 因为它们都各自具有不同的  $\nu_{j,c}$ 。

值得注意的是,  $\nu_{j,c}$  是不依赖空间步长的, 数值模拟某种炸药的正常爆轰时, 为使  $\nu_j = \nu_{j,c}$ , 可相应地调解人为粘性系数  $a$  及燃烧函数系数  $\alpha$  即可。  $\nu_2$ 、 $\nu_3$  则不然, 因其表达式中显含空间步长  $\Delta X$ , 当人为粘性系数选定后, 步长  $\Delta X$  变化, 相应地  $\nu_2$  (或  $\nu_3$ ) 亦将发生变化。这就是说, 用Cochran及Forest Fire化学反应率数值模拟正常爆轰时, 当选定炸药及人为粘性系数后, 还必须注意空间步长  $\Delta X$  大小的选取。

在附录II中, 以9404炸药为例, 给出了用Cochran化学反应率计算平面一维装药爆轰波的传播时, 压力波的传播随空间步长  $\Delta X$  (或参数  $\nu$ ) 的变化规律:

$$D_j = 0.88 \text{ cm } / \mu\text{s}$$

$$\gamma_{2c} = \frac{a\Delta X}{D_J} = 0.68 \quad (K = 3)$$

取  $a = 3$  时,  $\Delta X = 0.2(\text{cm})$

这就是说,用 Cochran 化学反应率模拟“9404”炸药的正常爆轰传播,数值计算的最佳空间步长是  $2\text{mm}$  (Cochran 化学反应率参数见附录 I)。

附录 II 计算表明,尽管数值计算中所用状态方程非为多方形式(具体形式见文献[4]),数值结果给出:当  $\Delta X = 2\text{mm}$  时,压力峰值约为  $36\text{GPa}$ ,与  $P_J(36.5\text{GPa})$  近似相等; $\Delta X$  增大时,压力波峰值下降; $\Delta X$  减小时,压力波峰值上升。请注意,此高于  $P_J$  的压力峰值的出现是由于引入人为粘性及反应率函数后,  $\gamma_2$  取值偏小所致,并非 Von Neumann 尖点。上述各种情况中爆速基本上维持不变,为  $0.88\text{cm}/\mu\text{s}$ ,即近似于  $D_J$ 。可见,数值结果与前面理论分析符合得很好。

亦或需要探讨新的人为粘性表达式,使其与 Cochran 或 Forest Fire 这二种化学反应率匹配使用时,将  $\gamma_2$  (或  $\gamma_1$ ) 中的  $\Delta X$  消掉,那样就可大大地扩大这二种化学反应率的使用范围了。

### 附录 I: 9404 炸药参数

$$D_J = 0.88\text{cm}/\mu\text{s} \quad \gamma = 2.91 \quad \rho_0 = 1.84 \quad P_J = 36.5\text{GPa}$$

#### A. Cochran 反应率中常数

$$w_1 = 1900\mu\text{s}^{-1}(\text{Mb})^{-n} \quad n = 3.2$$

$$w_2 = 24\mu\text{s}^{-1}(\text{Mb})^{-m} \quad m = 1$$

$$a = w_1(\rho_0 D^2)^n = 1900 \times (0.365 \times 4)^{3.2} = 6683$$

$$\beta = w_2(\rho_0 D^2)^m = 24 \times (0.365 \times 4) = 35.04$$

#### B. Forest Fire 反应率中常数

$$a_0 = -8.397913264 \quad a_1 = 5.88415048 \times 10^2 \quad a_2 = -2.717173703 \times 10^4$$

$$a_3 = 9.150077637 \times 10^5 \quad a_4 = -2.131904304 \times 10^7 \quad a_5 = 3.48633592 \times 10^8$$

$$a_6 = -4.065000891 \times 10^9 \quad a_7 = 3.411108204 \times 10^{10} \quad a_8 = -2.06135559 \times 10^{11}$$

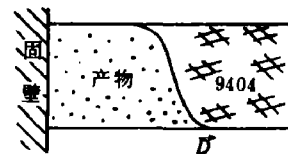
$$a_9 = 8.87902721 \times 10^{11} \quad a_{10} = -2.656797227 \times 10^{12} \quad a_{11} = 5.244124043 \times 10^{12}$$

$$a_{12} = -6.136602416 \times 10^{12} \quad a_{13} = 3.22335343 \times 10^{12}$$

## 附 录 II

用 Cochran 化学反应率计算“9404”炸药平面一维爆轰波的传播,试看其压力波随空间步长  $\Delta X$  (或参数  $\gamma$ ) 变化的规律(请注意:程序中所用状态方程不是多方形式,参见文献[4])。

计算模型如图所示。总长为  $l\text{cm}$  的平面一维装药“9404”,左端边界条件为固壁,右端为自由面。起爆条件是于左端固壁处给一波后  $CJ$  状态:



$$F = 1, \quad p = p_{cJ}, \quad \rho = \rho_{cJ}, \quad u = u_{cJ}$$

计算结果列于下表, 表中  $p^{max}$ :  $t$  时刻行波的最高压力峰值;  $D$ : 从  $2\mu s$  到  $10\mu s$  这一时间间隔内行波前进的平均速度。

$\Delta X (mm)$ { $\gamma$ } *	行 波									$\bar{D}$ ( $mm/\mu s$ )	
6 {2.05}	$t (\mu s)$	2.06	3.13	4.11	5.06	6.02	7.11	8.08	10.0		9.03
	$p^{max} (GPa)$	31.18	31.33	31.23	31.25	30.83	31.09	30.50	30.80		
4 {1.36}	$t (\mu s)$	2.08	3.07	4.05	5.02	6.07	7.05	8.04	10.07		8.64
	$p^{max} (GPa)$	32.50	32.21	32.52	32.89	32.91	32.66	32.36	32.91		
2 {0.68}	$t (\mu s)$	2.01	3.01	4.02	5.02	6.03	7.04	8.00	10.01		8.76
	$p^{max} (GPa)$	36.2	36.45	35.99	36.53	35.75	36.61	36.30	36.48		
1.6 {0.55}	$t (\mu s)$	2.02	3.01	4.00	5.02	6.01	7.03	8.02	10.0		8.81
	$p^{max} (GPa)$	36.61	37.83	37.01	37.77	36.99	37.66	37.47	37.27		
1 {0.34}	$t (\mu s)$	2.02	3.02	4.01	5.00	6.01	7.01	8.0	10.01		8.79
	$p^{max} (GPa)$	39.52	39.68	40.46	40.71	40.74	40.41	39.62	40.39		
0.5 {0.17}	$t (\mu s)$	2.00	3.01	4.01							
	$p^{max} (GPa)$	45.27	43.89	43.68							

\* 花括号 { } 内数字为  $\Delta x$  对应的  $\gamma$  值

### 参 考 文 献

- [1] Fickett, w., Davis, W. C., Detonation, Univ. Calif. Press, Berkeley, Los Angeles, London, (1979).
- [2] 朱建士等, 爆炸与冲击, 3(1)(1983), 21.
- [3] Mader, C. L., Numerical Modeling of Detonations, Univ. Calif. press, Berkeley, (1979).
- [4] Cochran, S. G., Chan, J., UCID-18024, (1979).
- [5] 里奇特迈尔, R. D., 初值问题的差分方法, 科学出版社, (1966).

## RELATION BETWEEN ARTIFICIAL VISCOSITY AND CHEMICAL REACTION RATE LAW IN NUMERICAL SIMULATION OF STEADY DETONATION

Liu Eryan

### Abstract

In this paper, phenomenological relations between artificial viscosity and chemical reaction rate laws (the velocity burn, Cochran and Forest Fire, respectively) are presented. The relations are used in numerical simulation for steady detonation of high explosives. Numerical results of explosive PBX-9404 are provided.