

爆轰波数值计算中人为粘性 与空间步长的匹配关系

曹菊珍

(1985年8月24日收到)

在平面爆轰波的数值计算中，各种假设的化学反应率，在爆轰波达到定态时，数值计算一定要符合 Chapman—Jouguet 理论。也就是说，在声速点的波后流场与 C-J 模型相一致。本文采用了文献(1)中的 Cochran 反应率和相应状态方程，导出了人为粘性系数与空间步长的匹配关系，当符合此条件时，数值计算的爆轰波速度才能是 C-J 条件，并保证声速点的状态——压力、密度、内能等符合 C-J 条件。

一、考虑粘性的瑞利方程

定常平面一维爆轰波满足质量、动量、能量方程为

$$\begin{cases} \rho u = \rho_0 u_0 \\ P + q + \rho u^2 = P_0 + \rho_0 u_0^2 \\ e + (P + q)v + \frac{u^2}{2} = P_0 v_0 + e_0 + \frac{u_0^2}{2} \end{cases} \quad (1.1)$$

其中 $\rho, u, P, e, v \left(\frac{1}{\rho} \right), q$ 分别表示密度、速度、压力、单位质量内能、比体积及人为粘性压力。

t, x 分别为时间和欧拉坐标。(1.1) 式中下标“0”表示波前，认为是均匀的，故 $q_0 = 0$

由 (1.1) 式中第二、三式得到 q 的表达式为

$$q = P_0 - P + \rho_0 u_0^2 (1 - \rho_0 / \rho) \quad (1.2)$$

$$q = -P + \rho (e_0 - e) + \frac{\rho u_0^2}{2} \left(1 - \frac{\rho_0^2}{\rho^2} \right) + P_0 v_0 \rho \quad (1.3)$$

人为粘性在一维、二维计算程序中表示成

$$q = \begin{cases} 0 & (\partial u / \partial x) \geq 0 \\ (P v / v_0^2) (\partial u / \partial x)^2 & (\partial u / \partial x) < 0 \end{cases} \quad (1.4)$$

其中 l 满足

$$l = a * \Delta x / \Phi \quad (1.5)$$

a 是人为给定的人为粘性常数, Δx 为计算网格尺寸, $\Phi(\rho_0/\rho)$ 为密度比

$$\Phi = \rho_0 / \rho \quad (1.6)$$

由(1.2) 与 (1.3) 相等, 得到

$$e - e_0 = \frac{u_0^2}{2} (1 - \rho_0/\rho)^2 + P_0 (v_0 - v) \quad (1.7)$$

引进量 F 为炸药化学反应时反应分数。则化学反应率 R 有

$$R = \frac{dF}{dt} \quad (1.8)$$

[1] 中 Cochran 反应率为

$$R = (1 - F)(w_1 P^n + w_2 F P^m) \quad (1.9)$$

这里 w_1, w_2, n, m 均为常数, [1] 已给出 TATB 和 PBX-9404 两种炸药的参数值, 见表 1

这样 (1.4) 中的

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial F} \frac{\partial F}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial F} \left(\frac{1}{u} \frac{\partial F}{\partial t} \right) = \frac{\partial u}{\partial F} \left(\frac{R}{u} \right) \quad (1.10)$$

由(1.1)中第一式

$$\frac{du}{dF} = u_0 \frac{d\Phi}{dF} \quad (1.11)$$

这样一来

$$q = \frac{l^2 v}{v_0^2} \left(\frac{u_0}{u} \right)^2 R^2 \left(\frac{d\Phi}{dF} \right)^2 = l^2 \rho (1 - F)^2 (w_1 P^n + w_2 F P^m)^2 \left(\frac{d\Phi}{dF} \right)^2 \quad (1.12)$$

将(1.12) 代入 (1.2) 得到

$$\frac{l^2 \rho_0}{\Phi} (1 - F)^2 (w_1 P^n + w_2 F P^m)^2 \left(\frac{d\Phi}{dF} \right)^2 = P_0 - P + \rho_0 u_0^2 (1 - \Phi) \quad (1.13)$$

进一步改写(1.13) 式得到

$$\left(\frac{d\Phi}{dF} \right)^2 = \rho_0 \Phi^3 (P_0 - P + \rho_0 u_0^2 (1 - \Phi)) / a^2 \Delta x^2 (1 - F)^2 (w_1 P^n + w_2 F P^m)^2 \quad (1.14)$$

要想数值积分(1.14)式, 必须要有状态方程, 本文仍用[1]中的状态方程形式

$$\begin{cases} P = (1 - F)P_1 + F P_2 \\ E = (1 - F)E_1 + F E_2 - F Q \end{cases} \quad (1.15)$$

这里 E 为单位体积的内能。足标 “1” 表示未反应的炸药量; 足标 “2” 表示炸药产物的量; Q 为炸药化学反应释放能。[1] 进一步给出下面关系

$$\left\{ \begin{array}{l} P_1 = A_1 \Phi^{-e_1} - B_1 \Phi^{-f_1} + \frac{D_1 \varepsilon_{th}}{C_1 \Phi} \\ P_2 = A_2 e^{-e_2 \Phi} + B_2 e^{-f_2 \Phi} + \frac{D_2 \varepsilon_{th}}{C_2 \Phi} \\ E_1 = \frac{A_1}{e_1 - 1} \Phi^{-e_1 + 1} - \frac{B_1}{f_1 - 1} \Phi^{-f_1 + 1} + \varepsilon_{th} \\ E_2 = \frac{A_2}{e_2} e^{-e_2 \Phi} + \frac{B_2}{f_2} e^{-f_2 \Phi} + \varepsilon_{th} \end{array} \right. \quad (1.16)$$

这里 A_i 、 B_i 、 C_i 、 D_i 、 e_i 、 f_i ($i = 1, 2$) [1] 中均有数值, 见表 1; ε_{th} 是与温度有关的量。

值得注意的是, 这里 E 有关系式

$$E = \rho_0 e$$

$$\therefore e = \frac{1}{\rho_0} E \quad e_0 = \frac{1}{\rho_0} E_1 (\Phi_0, \varepsilon_{th}^0)$$

这样, (1.7) 就有下面表达式

$$\frac{1}{\rho_0} (1 - F) E_1 + \frac{F}{\rho_0} E_2 - \frac{F Q}{\rho_0} = \frac{1}{\rho_0} E_1 (\Phi_0, \varepsilon_{th}^0) + \frac{1}{2} u_0^2 (1 - \Phi)^2 + P_0 v_0 (1 - \Phi) \quad (1.17)$$

再将 (1.16) 中 E_1 、 E_2 代入 (1.17) 得到

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho_0} \varepsilon_{th} &= \frac{1}{\rho_0} E_1 (\Phi_0, \varepsilon_{th}^0) + \frac{u_0^2}{2} (1 - \Phi)^2 + P_0 v_0 (1 - \Phi) \\ &- \frac{(1 - F)}{\rho_0} \left(\frac{A_1}{e_1 - 1} \Phi^{-e_1 + 1} - \frac{B_1}{f_1 - 1} \Phi^{-f_1 + 1} \right) \\ &- \frac{F}{\rho_0} \left[\frac{A_2}{e_2} e^{-e_2 \Phi} + \frac{B_2}{f_2} e^{-f_2 \Phi} \right] + \frac{F}{\rho_0} Q \end{aligned} \quad (1.18)$$

$$\text{其中 } E_1 (\Phi_0, \varepsilon_{th}^0) = \left(\frac{A_1}{e_1 - 1} - \frac{B_1}{f_1 - 1} \right) + \varepsilon_{th}^0 \quad (1.19)$$

其中 ε_{th}^0 为初始热能值, 见表 1

表 1 计算参数

	P B X - 9404	T A T B	单 位		P B X - 9404	T A T B	单 位
ε_{th}^0	5.5×10^{-3}	5.5×10^{-3}	Mb	e_1	4.6	4.46	/
Q	0.122	0.08	Mb	f_1	1.35	1.2	/
n	3.2	6.7	/	D_2/C_2	0.25	0.25	/
m	1	1	/	A_1	0.12696	0.1218	Mb
w_1	2.6×10^3	1.4×10^5	$\mu s^{-1} (Mb)^{-1}$	B_1	0.12184	0.11584	Mb
w_2	20	10	$\mu s^{-1} (Mb)^{-1}$	e_1	4.1	5.0	/
A_2	8.545	6.5467	Mb	f_1	3.1	4.0	/
B_2	0.205	0.07123	Mb	ρ_0	1.84	1.898	g/cm^3
P_0	0.01023	0.01023	Mb	u			$cm/\mu s$
t			μs	x			cm

由(1.18)求 ε_{th} 表达式后, 我们不难求出压力表达式

$$\begin{aligned} P &= (1 - F)P_1 + FP_2 \\ &= (1 - F) \left[A_1 \Phi^{-\epsilon_1} - B_1 \Phi^{-f_1} + \frac{D_1 \varepsilon_{th}}{C_1 \Phi} \right] \\ &\quad + F \left[A_2 e^{-\epsilon_2 \Phi} + B_2 e^{-f_2 \Phi} + \frac{D_2 \varepsilon_{th}}{C_2 \Phi} \right] \end{aligned} \quad (1.20)$$

将 P 代入(1.14), 把 $\rho \Delta x$ 作为参数, 就能数值积分(1.14)式, 得到的积分曲线见图 3。

二、不考虑粘性的瑞利方程

将(1.2)中 q 认为是零, 再代入 P 的表达式(1.20)得到

$$\begin{aligned} (1 - F) \left[A_1 \Phi^{-\epsilon_1} - B_1 \Phi^{-f_1} + \frac{D_1 \varepsilon_{th}}{C_1 \Phi} \right] + F \left[A_2 e^{-\epsilon_2 \Phi} + B_2 e^{-f_2 \Phi} + \frac{D_2 \varepsilon_{th}}{C_2 \Phi} \right] \\ = P_0 + \rho_0 u_0^2 (1 - \Phi) \end{aligned} \quad (2.1)$$

再利用(1.18)和(1.19)就能积分(2.1)。

这就是考虑相应状态方程下的瑞利线方程。

不同爆速 u_0 值, 瑞利线亦不同, 见图 2。

三、物理图象分析

在 $p \sim \Phi$ 图上爆轰波结构如图 1。

对于Z-N-D经典爆轰波模型, 冲击波将状态“1”冲击压缩到状态“2”(即V-N尖点), 然后沿瑞利线下降至C-J点。C-J爆轰瑞利线与产物雨贡组线是相切。其切点就是C-J状态点。但是考虑人为粘性以后, 直的瑞利线就变为虚线状, 冲击波的过渡区使状态“1”均匀地过渡到“3”点, 然后沿直的瑞利线下降至C-J点。一定的人为粘性与空间步长, 它可以使爆轰波计算不再出现“3”状态点, 而直接到达C-J点。爆轰波结构内 $P \sim \Phi$ 的走向, 也有可能落在“1”与C-J点之间的瑞利线上, 此时就不再有解, 只有在改变爆速 u_0 的值, 才能有解, 于是出现弱爆轰解。对应图上 $s w I$ 直线。

图 2 是在微型计算机上, 对式(2.1)进行数值积分, 得到不同爆速下一组曲线。从图 2 可知, 对于C-J爆轰, PBX-9404的爆速 $D_1 \approx 0.88 \text{ cm}/\mu\text{s}$ 左右, 而钝感炸药TATB的 $D_1 = 0.75 \text{ cm}/\mu\text{s}$ 左右。因为此时曲线与 $F = 1$ 的直线相切。对应的切点 $\Phi \approx 0.75$ 。

当考虑人为粘性以后, 如图 2 所示呈二次曲线状的瑞利曲线改变形状, 是由方程(1.14)

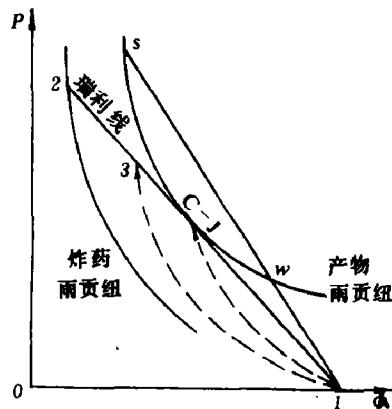


图 1 爆轰波结构图

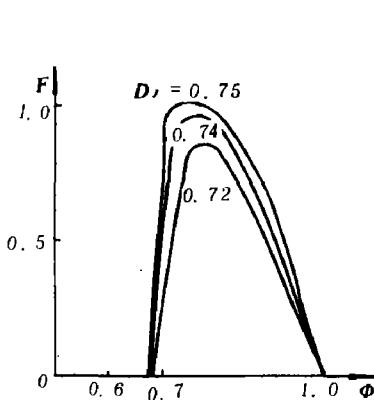
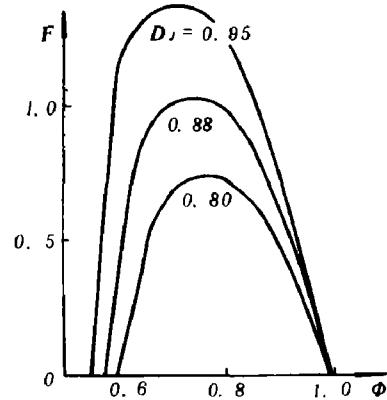


图2 TATB不同爆速下的瑞利线



PBX-9404 不同爆速下的瑞利线

所决定的。图3和图4分别给出了PBX-9404和TATB炸药的积分曲线。其中 $\bar{l} = a * \Delta x$ 作为参数。图3和图4还分别给出了 $F \sim \Phi$ 关系及 $P \sim \Phi$ 关系。图中对 $F = 0$ 或 $F = 1$

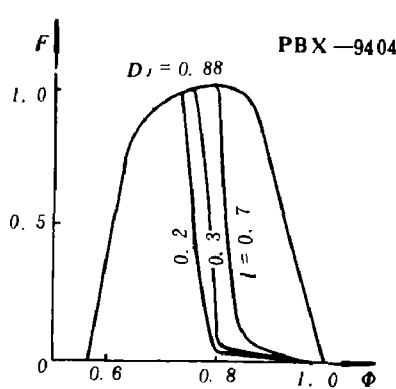
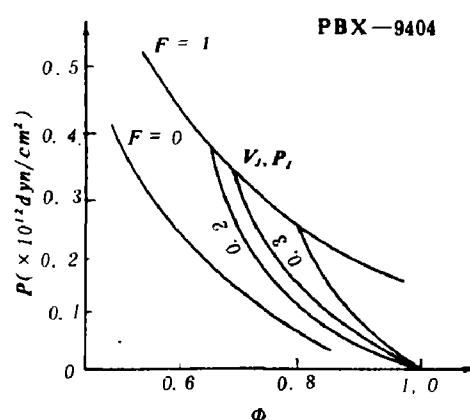


图3 PBX-9404 考虑人为粘性瑞利积分曲线
 $F \sim \Phi$ 图
图中给出 \bar{l} 为 $0.2\text{ cm}, 0.3\text{ cm}, 0.7\text{ cm}$ 的情况



在 $P \sim \Phi$ 图中给出 \bar{l} 为 $0.2\text{ cm}, 0.3\text{ cm}, 0.7\text{ cm}$ 的积分曲线图

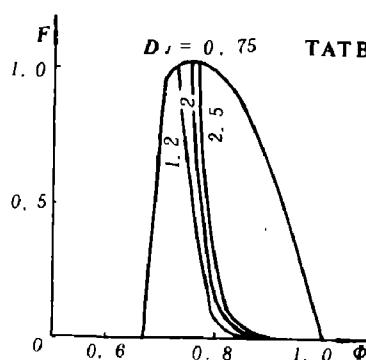
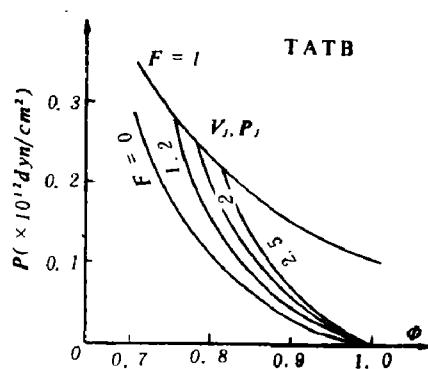


图4 TATB炸药, 考虑粘性后瑞利积分曲线 $F \sim \Phi$ 图
 \bar{l} 分别为 $1.2\text{ cm}, 2\text{ cm}, 2.5\text{ cm}$ 的情况



$P \sim \Phi$ 图积分曲线
 \bar{l} 分别为 $1.2\text{ cm}, 2\text{ cm}, 2.5\text{ cm}$ 的情况

的雨贡组曲线可参考〔2〕。从图3中可知，当 $\bar{l} = a * \Delta x$ 为0.3cm左右，积分曲线直接到达C-J状态点。当 $\bar{l} > 0.3\text{cm}$ 时就可能出现弱爆轰。此时爆速比 D_s 值大。故在计算PBX-9404炸药对飞片驱动问题时，必须使 $\bar{l} = a * \Delta x = 0.3\text{cm}$ 为好。

从图4看出，对TATB，当 $\bar{l} = a * \Delta x$ 为2左右，积分曲线直接达到C-J状态(*)点。当 $\bar{l} > 2$ 时，有可能出现爆速大于 D_s 值的弱爆轰。从而看出，对一定的 a 值，TATB数值计算时所取的空间步长远比PBX-9404大得多。如果状态方程取熟知的 $A\rho^k$ 形式，则计算就简单得多，可参考〔3〕。

参 考 文 献

- 〔1〕 Cochran, G., Chan, J., UCID-18024, (1979).
- 〔2〕 曹菊珍、戴照双，第二届全国爆炸力学学术会议论文集，第二册，§ 2-4-4 (1981).
- 〔3〕 朱建士、魏振典、周德忠，爆炸与冲击，3(1)(1983), 21.

RELATION BETWEEN ARTIFICIAL VISCOSITY AND MESH SIZE IN NUMERICAL MODELLING OF DETONATION

Cao Juzhen

Abstract

In numerical modelling of the plane detonation wave, the state behind steady detonation must be in agreement with the Chapman-Jouguet theory for all of the burn techniques, i.e. it can be described by the Taylor wave. The matching relation between the coefficient of artificial viscosity and the mesh size is obtained in this paper by choosing Cochran's rate function⁽¹⁾. Only if this condition is satisfied, the detonation wave of numerical calculation can be in agreement with the C-J theory.