

二维数值模拟爆轰中化学 反应率的应用

刘尔岩 姜幼明

(应用物理与计算数学研究所)

摘要 统一“定常爆轰数值模拟中化学反应率与人为粘性的相关性”，本文对体积起爆函数进行了一维、二维系统考查，并与Cochran反应率做了二维对比计算给出数值结果。数值模拟爆轰的复杂相互作用，应用体积起爆函数为好。

关键词 二维数值模拟；爆轰；化学反应率

我们知道，数值模拟平面一维定常爆轰的传播，用Cochran或Forest Fire反应率时，取定人为粘性系数后，空间步长 Δl 的选取必须小于或等于临界步长 Δl_c ，否则将出现“弱爆轰”，而体积起爆函数对空间步长没有这种显式关系^[1]。在二维爆轰数值模拟中，有时难以保证在爆轰波的传播方向上处处满足上述条件，这就使得Cochran及Forest Fire反应率的应用受到了限制。我们用APHEMP程序对体积起爆函数进行了一维、二维系统考查，并与Cochran反应率做了二维对比计算。

一、体积起爆化学反应率及状态方程

1. 体积起爆化学反应率

$$F = \frac{1 - \bar{V}}{1 - \bar{V}_j} = (1 - \bar{V})\beta$$

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， $\beta = 1/(1 - \bar{V}_j)$ 。

2. 状态方程

$$\rho = (r-1)(\mu+1)\epsilon F$$

其中

$$F = \begin{cases} 0 & \text{固体炸药} \\ (1 - \bar{V})\beta & \text{过渡区} \\ 1 & \text{爆轰产物} \end{cases}$$

式中 ϵ 是比内能， p 为压力， $\mu = [(1/V) - 1]$ 以PBX-9404炸药为例做了计算，炸药参数 $D_j = 8800 \text{ m/s}$ ， $\rho_0 = 1.84 \text{ g/cm}^3$ ， $\gamma = 2.9$

二、人为粘性系数 a 的选取

APHEMP程序中，人为粘性

$$q = \frac{a^2 \rho_0 A (\dot{V}/V)^2}{V}, \quad (\dot{V}/V < 0), \quad A - \text{网格面积}$$

我们知道,人为粘性系数 a 选得太小时,波阵面峰值偏高; a 选得偏大时,波阵面宽度将拉得太宽,为此做了一系列一维对比计算,见表1.2.

表1 a 不同时,压力峰值 p^{max} 随时间的增长

p^{max} (GPa)	$t(\mu s)$	3	4	5	6	7	8	9	10	11
a										
3		29.1	32.8	33.9	34.3	35.0	35.7	35.6	36.1	36.1
2.5		33.7	35.3	36.0						
2		32	34	35.3	35.3	36.2	36.3	36.4	36.7	36.5
1.5		33.0	35.4	36.0	36.1	36.8	36.9	36.9	37.3	37.2
1.0		34.7	37.0	37.8	37.7	38.4	38.8	38.0	39.2	39.3

取空间步长 $\Delta X = 0.2 \text{ cm}$.

表2 化学反应区宽度 Δl 随 a 的变化

$\Delta l(\text{cm})$	a	3	2	1.5	1.0
起爆函数					
Cochran 反应率		0.2			
体积起爆		0.5	0.32	0.28	0.18

取 $\Delta X = 0.2 \text{ cm}$, Δl 为压力波前沿从10GPa增长到30GPa的空间宽度

统观表1.2,在APHEMP程序中,用体积起爆函数计算时,我们选取 $a=2$

三、数值模拟平面一维爆轰

在两端皆为自由面的平面一维爆轰系统中,选定炸药中左端三个点为起爆点,用体积起爆函数进行了计算,结果参见表3.

表3 用体积起爆函数数值模拟平面一维爆轰

p^{max} (GPa)	$t(\mu s)$	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	\bar{D} (m/s)
$\Delta X(\text{cm})$												
0.4			26.79	29.32	31.11	32.80	34.25	35.29	35.74	35.86	35.83	8770
0.2			32	33.87	35.27	35.26	36.2	36.25	36.43	36.65	36.54	8830
0.1			34.87	35.64	36.14	36.38	36.6					8830
0.05		35.26	36.03	36.24								8830

从表3可见,当爆轰波基本上趋于稳定后,爆速平均值 \bar{D} 及波阵面上压力峰值 p^{max} 随

空间步长变化不明显，趋于一稳定值 $\bar{D} \approx 8800$ m/s, $p^{max} \approx 36$ GPa, 当空间步长 ΔX 由 0.4 cm 减少到 0.05 cm 时, 相对变化为

$$\frac{\Delta \bar{D}}{\bar{D}} = 0.6\%, \quad \frac{\Delta p^{max}}{p^{max}} = 0.99\%。$$

四、体积起爆函数与 Cochran 反应率的二维数值模拟对比

为进一步考查体积起爆函数与空间步长的关系, 我们对球面散心爆轰过程用体积起爆函数及 Cochran 化学反应率^[1] 分别做了二维对比计算, 波阵面随时间的发展变化及各时刻的压力分布参见图 1 ~ 3。

网格的划分, 取空间步长 $\Delta X = \Delta Y = 0.16$ cm。图 1 中网格成角 45° , 图 3 中网格成角 90° , 起爆条件同于一维。图 1 是用体积起爆函数计算的结果, 图 2 ~ 3 是用 Cochran 反应率计算的结果。

图 3 计算的是二个球面散心爆轰波相互作用的图象, 网格是正交的, 且满足 $\Delta t \leq \Delta l$ 条件, 用 Cochran 反应率计算的波阵面随时间的发展基本上保持球面波。

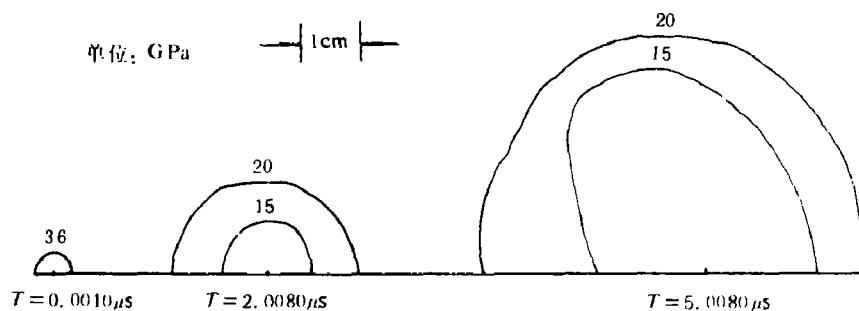


图 1 球面散心爆轰, HEMP 计算的各时刻等压线图示
(网格步长 $\Delta X = \Delta Y = 0.16$ cm, 网格成 45° 角, 未画出)

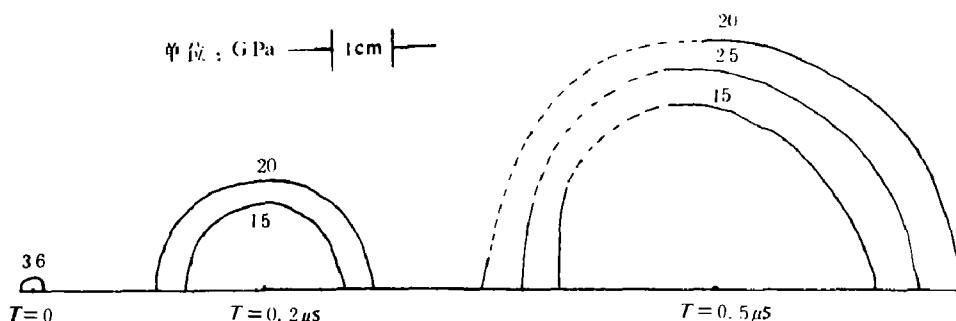


图 2 球面散心爆轰, HEMP 计算的各时刻等压线图示
(网格步长 $\Delta X = \Delta Y = 0.16$ cm, 网格成 45° 角, 未画出)

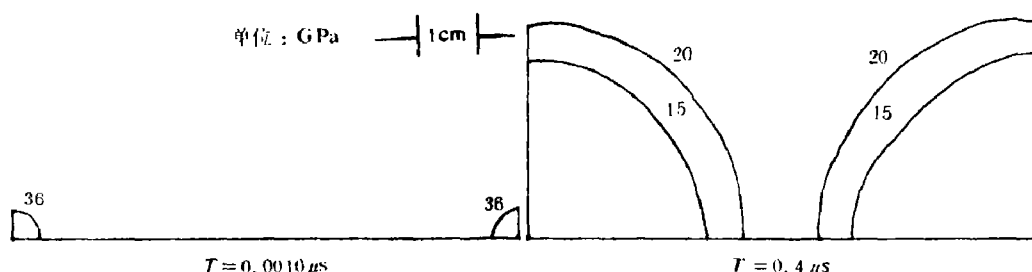


图3 球面散心爆发, HEMP计算的各时刻等压线图示
(网格步长 $\Delta X = \Delta Y = 0.16$ cm, 网格成 90° 角, 未画出)

图1-2都是斜网格, 沿网格长对角线方向 $\Delta_l > \Delta_l$, 用Cochran反应率计算(图2)时, 出现了“弱爆轰”图象^[1], 即沿长对角线方向爆轰波传播得非常快, 致使整个波阵面随时间的发展偏离球面波越来越远; 而用体积起爆函数计算时, 波阵面随时间的发展基本上保持为球面波(图1, 除去数值计算引入的截断误差)

综上, 我们看到, 在结构复杂的设计中, 难以保证网格在波的传播方向上处处满足 $\Delta_l \leq \Delta_l$ 时, 应用体积起爆函数为好, 因为其爆速、爆压随空间步长变化不明显

参 考 文 献

- [1] 刘尔岩, 爆炸与冲击, 5(3)(1985), 35.

APPLICATION OF CHEMICAL REACTION RATES IN TWO-DIMENSIONAL NUMERICAL SIMULATION OF DETONATION

Liu Eryan Jiang Youming

(Institute of Applied Physics and Computational Mathematics)

ABSTRACT Continuing from the previous article "relation between artificial viscosity and chemical reaction rate law in numerical simulation of steady detonation" by the author, in this paper the volume-burn function is tested in one-dimensional and two-dimensional systems, and compared with that of a two dimensional simulation by using cochran reaction rate. The calculated results is given. It seems that the better way is utilizing the volume-burn function to simulate numerically the complex interaction in detonation

KEY WORDS two-dimensional numerical simulation, detonation, chemical reaction rate.