

# 随机选取法计算化学反应流 爆轰过程引起的参数涨落<sup>\*</sup>

陈森华 柏劲松

(中物院流体物理研究所 成都 610003)

**摘要** 利用 RCM (随机选取法) 解反应流爆轰问题时, 掌握影响流动参数随机涨落的主要因素是选择适当计算参数, 保证得到正确结果的关键。各种流动参数的随机涨落相互关联, 只需要搞清楚炸药未反应质量分数的随机涨落并做出分析, 其它流动参数涨落的情况也就清楚了。给出了影响未反应质量分数涨落的因数, 同时还给出了具体算例, 检验所得结论的正确性。

**关键词** 气体动力学 爆轰波 数值模拟 随机选取法

**中图法分类号** O 381

## 1 引 言

RCM (随机选取法) 是一种解守恒型双曲型方程的数值方法, 该方法于 1965 年由 Glimm<sup>[1]</sup> 首先提出, 1976 年 Chorin<sup>[2]</sup> 作了改进后开始应用于解齐次气体动力学方程。Sod<sup>[3]</sup> 首先将算子分裂技术应用于随机选取方法, 使解带源项的非齐次方程也成为可能, 拓广了随机选取方法的应用范围。Chorin<sup>[4]</sup> 最早将 RCM 应用于化学反应流的爆轰计算, 他的计算没有采用算子分裂技术, 化学反应的贡献体现在求解黎曼问题中。Bukiet<sup>[5]</sup> 通过数值模拟研究非理想爆轰波的  $D_n - \kappa$  关系时, 首先将算子分裂技术应用于求解反应流的随机选取方法, 使方法得到很大简化。一般的有限差分方法, 由于人为粘性或格式粘性的影响, 将间断面抹平成为几个网格宽度的光滑过渡区, RCM 用于计算含有间断面的问题克服了这个缺点, 间断面形成的过渡区只占一个网格, 在进行化学反应流爆轰计算时这个优点尤为突出, 它所计算得到的 Von Neumann 峰很尖锐。

利用 RCM 解化学反应爆轰问题, 原则上与解无化学反应的冲击波问题没有太大差别。但是由于化学反应的引入, 在化学反应区出现了 Von Neumann 尖峰, 这就意味着化学反应区存在大的流动参数梯度, 与无化学反应的冲击波计算比较, 随机点游动时坐标的变化会引起流动参数更大的涨落。如果计算参数选择不当, 例如空间步长取得过大, 流动参数的随机涨落将明显增大, 甚至会得不到正确的计算结果; 或者由于空间或时间步长取得过小, 使计算的工作量变得很大。各种流动参数的随机涨落相互关联, 只要找出计算参数对一种流动参数的影响, 即可判断其它流动参数的涨落情况。无论什么情况, 先导冲击

<sup>\*</sup> 中国工程物理研究院科学技术基金资助, YKXJ-06-95-410  
1996-09-19 收到原稿。

波阵面上炸药的未反应质量分数  $\lambda$  的理论值都是 1, 因此研究  $\lambda$  计算值偏离 1 的大小是研究 RCM 计算值随机涨落最简易的方法。我们在对 RCM 做简要介绍后, 对影响波阵面上  $\lambda$  计算值随机涨落的因素进行分析, 找出影响这种参数随机涨落的主要因素。根据这个参数随机涨落的情况即可判断所有其它参数的情况。我们还将给出具体的算例, 通过它们检验所得结果的正确性。

## 2 基本方程及数值方法

一维反应流满足的 Euler 坐标流体力学方程组为

$$\mathbf{W}_t + \mathbf{F}(\mathbf{W})_r = \mathbf{C}(\mathbf{W}) - \mathbf{TG}(\mathbf{W}) \quad (1)$$

式中:

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} d \\ m \\ e \\ \chi \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}(\mathbf{W}) = \begin{pmatrix} m \\ \frac{m^2}{d} + p \\ \frac{m(e+p)}{d} \\ m\lambda \end{pmatrix}, \quad \mathbf{C}(\mathbf{W}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \chi R(\lambda, T) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}(\mathbf{W}) = \begin{pmatrix} \frac{m}{r} \\ \frac{m^2}{rd} \\ \frac{m(e+p)}{r} \\ \frac{m\lambda}{r} \end{pmatrix};$$

$T = 0, 1, 2$  分别表示平面、柱面、球面对称情况;  $p, d, m, e, R, T$  分别表示压强、密度、动量 ( $m = \chi u$ )、单位体积总能量、反应率、温度 ( $T = p/d$ )、单位体积总能量定义如下

$$e = \chi X + \frac{1}{2} \chi u^2 \quad (2)$$

$X$  表示内能, 对于多方气体

$$X = \frac{p}{(\gamma - 1)d} + \lambda q \quad (3)$$

$q$  表示反应热。

为了求解方程 (1), 利用算子分裂的随机选取方法<sup>[5]</sup>, 将方程 (1) 分裂为以下三个方程

$$\mathbf{W}_t + \mathbf{F}_i(\mathbf{W}) = 0 \quad (4)$$

$$\mathbf{W}_t = -\mathbf{TG}(\mathbf{W}) \quad (5)$$

$$\mathbf{W}_t = \mathbf{C}(\mathbf{W}) \quad (6)$$

网格划分如图 1 所示。将每个  $\Delta t$  分为两个  $\Delta t/2$  两个时间半步长计算交替在整点和半点上进行, 每个半步长计算都采用同样方法顺序求解方程 (4~6)。对于每个半步长, 首先根据方程 (4) 求得 Riemann 问题的解  $\mathbf{R}(r, t)$ , 通过随机取样过程, 求出齐次方程 (4) 在网格点  $(j, n)$  上的解

$$\tilde{\mathbf{W}}_j^n = \mathbf{R}[(j + K_n)\Delta r, n\Delta t] \quad (7)$$

此处  $n, j$  可以取半点或者整点上的值, 即  $j = 0, 1, 2, \dots, n = 0, 1, 2, \dots$ , 或者  $j = 1/2, 3/2, 5/2, \dots, n = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$ ,  $K_n$  是  $[-1/2, 1/2]$  内均分布的随机数。然后以 (7) 式作为初值依次求解常微分方程 (5) 及反应率方程 (6), 作非齐次修正, 即

$$\tilde{\tilde{\mathbf{W}}}_j^n = \tilde{\mathbf{W}}_j^n - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{TG}(\tilde{\mathbf{W}}_j^n) \quad (8)$$

$$W_j^n = \tilde{W}_j^n + \frac{\Delta t}{2} C(\tilde{W}_j^n) \quad (9)$$

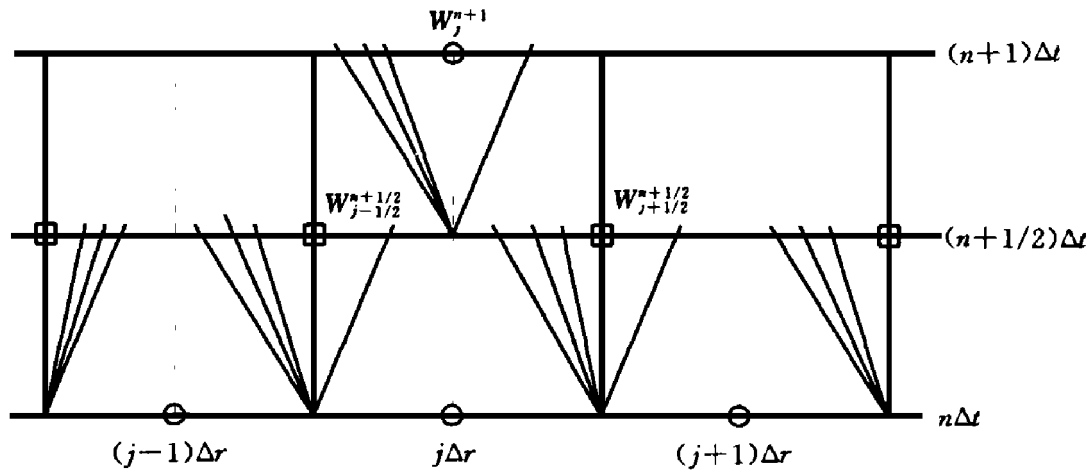


图 1 网格划分

Fig. 1 Grid configuration

### 3 未反应炸药质量分数的随机涨落

分裂算子的第一步, 解黎曼问题可得  $t = n\Delta t$  时刻冲击波阵面上的未反应质量分数  $\tilde{\lambda}_s^n$  如下

$$\tilde{\lambda}_s^n = \begin{cases} \lambda_s^{n-1/2} & K_n \Delta r < \frac{1}{2} u_s \Delta t \\ 1 & \frac{1}{2} u_s \Delta t \leq K_n \Delta r \leq \frac{1}{2} D_s \Delta t \\ 1 & \frac{1}{2} D_s \Delta t < K_n \Delta r \end{cases} \quad (10)$$

式中: 下标  $s$  表示先导冲击波阵面所在网格点,  $D_s$  是先导冲击波速度,  $u_s$  是冲击波后粒子速度。在 (10) 式给出的几种情况中: 第一、二两种情况, 冲击波向右前进半个网格; 第二、三种情况,  $\tilde{\lambda}_s^n$  值都是 1; 在第三种情况其它参数都取冲击波前的值, 所以冲击波向左退后半网格。

在反应区宽度比波阵面曲率半径小得多的情况下, 有  $\Gamma_m \lambda / r \ll \kappa R$ 。为了便于分析, 可以不考虑分裂算法的第二步 (相应于解方程 (8)), 只考虑相应于解方程 (9) 的第三步, 即炸药燃烧, 得到下式

$$\lambda_s^n = \tilde{\lambda}_s^n + \Delta \lambda_s^n \quad (11)$$

式中:  $\Delta \lambda_s^n$  是  $t = t - \Delta t / 2$  到  $t = t$  时刻燃烧引起的质量分数改变。如果  $t^1$  和  $t^2$  是随机点连续落入先导冲击波与接触间断之间的两个时刻, 当  $t^1 < t < t^2$  时随机点将落到此区间之外。  $\tilde{\lambda}_s^n$  的计算值在此时间区间将完成一次从极大值到极小值的涨落 (见图 2)。从 (11) 式和  $\tilde{\lambda}_s^n = 1$  可得到计算  $\tilde{\lambda}_s^n$  的递推公式如下

$$\tilde{\lambda}_s^n = 1 + \Delta\lambda^{n_1} + \dots + \Delta\lambda^{n-1} \quad (n_1 < n < n_2) \quad (12)$$

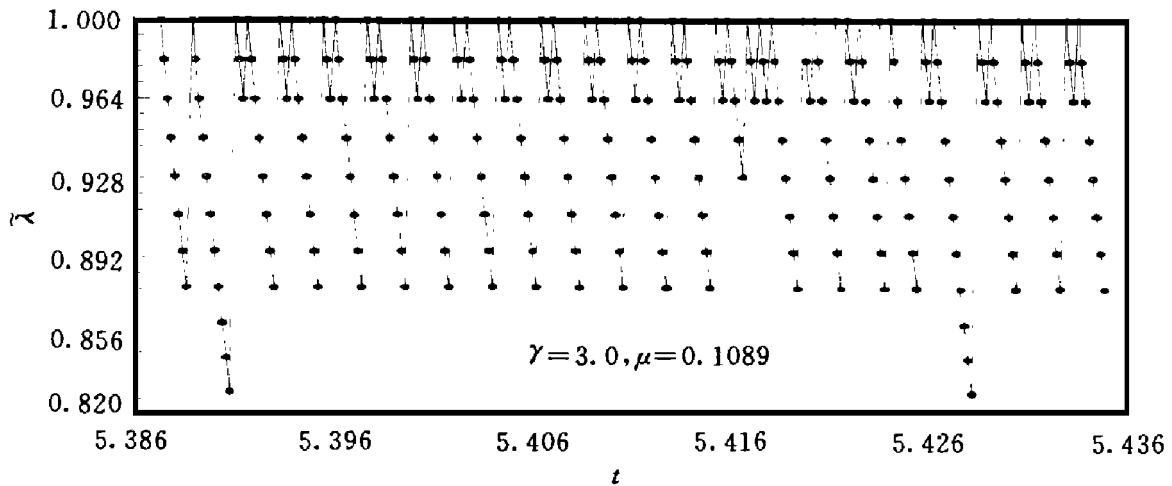


图 2  $\tilde{\lambda}-t$  曲线

Fig 2 Curve of  $\tilde{\lambda}-t$

在爆速偏离  $D_{CJ}$  不大的情况, 略去高阶量, 可得

$$\tilde{\lambda}_s^n = 1 - mR(W_{CJ})\Delta t/2 \quad (13)$$

式中:  $W_{CJ}$  是对应于 CJ 状态的  $W$ .  $m = 2(n - n_1)$  是随机点连续落在这一区域外的次数. 显然,  $m$  决定了波阵面上  $\lambda$  以及所有其它参数随机涨落的大小.

随机点连续  $m$  次落到先导冲击波与接触间断以外区域的概率是

$$P(m) = \left| 1 - \frac{(D_{CJ} - u_{CJ})\Delta t}{\Delta r} \right|^m \quad (14)$$

从上式可解得

$$m = \frac{\ln P(m)}{\ln \left| 1 - \frac{(D_{CJ} - u_{CJ})\Delta t}{\Delta r} \right|} \quad (15)$$

根据 (13)、(15) 式可解得  $\tilde{\lambda}_s^n$ , 按  $(D_{CJ} - u_{CJ})\Delta t/\Delta r$  对  $\tilde{\lambda}_s^n$  做幂级数展开, 略去高阶量可得

$$\tilde{\lambda}_s^n = 1 + \frac{1}{2} \ln P(m) \quad (16)$$

式中:  $\_ = R(W_{CJ})\Delta r/(D_{CJ} - u_{CJ})$

(16) 式是一个近似公式, 对于很大的  $m$  和  $\Delta t$  都不适用. 根据它很难准确给出  $\tilde{\lambda}_s^n$  的统计行为, 但是根据它却能定性给出统计行为的主要特征. 由 (16) 式可看出,  $\tilde{\lambda}_s^n$  涨落的统计行为主要决定于计算参数  $\_$ , 与  $\Delta t$  无关.  $\_$  的减小可以使  $\lambda_s$  涨落的振幅相应减小, 但是不可能依赖变化  $\Delta t$  来减小涨落振幅. 网格尺寸、化学反应速率以及炸药的其它特性参数的影响都隐含在  $\_$  中.

对于多方气体, 由 Hugoniot 关系可得

$$D_{CJ} - u_{CJ} = \frac{(V_- - 1)M^2 + 2}{(V_+ - 1)M^2} D_{CJ} \quad (17)$$

式中:  $M = D_{CJ}/c_0$  是爆轰波的 Mach 数. 从 (16)、(17) 式可以直接看出  $V$  对于  $\lambda_s^n$  涨落振幅

的影响,  $V$  越小振幅越大。

$K_n$  并不一定要求是随机数构成的序列, 实践证明, 某些在  $[-1/2, 1/2]$  间均匀分布的序列  $E_n$  同样也可以用来代替序列  $K_n$ 。在不会引起误解的情况下,  $E_n$  也称为随机数序列, 也按随机数序列对待。假定对于  $E_n$ , (14)~(16) 式仍旧成立。应当注意到, 不同类型的随机数序列的统计特性不同。均匀性好的序列,  $n_2 - n_1$  取值小的几率要大一些, 从 (13) 式可知  $\bar{\lambda}_n^2$  与 1 的偏离比较小的几率也要大一些。由于 (16) 式是近似表达式, 所以反映不出随机数均匀性不同带来的差别。

### 4 随机数

我们选用了两种比较典型的随机数序列。

(1) Chorin 随机数序列<sup>[2]</sup>: 设  $m_1, m_2$  是两个互质正数,  $m_2 > m_1$ , 给定整数  $N_0 < m_2$  构成如下序列

$$N_{i+1} = (N_i + m_1) \pmod{m_2} \tag{18}$$

令  $\theta_i$  是在区间  $[0, 1]$  内均匀分布的伪随机数, 可得如下区间  $[-1/2, 1/2]$  内均匀分布的 Chorin 随机数序列

$$K_i = [(N_i + \theta_i + \frac{1}{2}) m_2 - \frac{1}{2}] \tag{19}$$

(2) Van der Corput 随机数序列<sup>[6]</sup>: 设  $k_1, k_2$  是两个互质正数,  $k_1 > k_2$ , 将  $i$  表示为  $k_1$  进制数

$$i = \sum_{l=0}^m n_l k_1^l \tag{20}$$

Van der Corput 随机数序列由下式给出

$$E_i = \sum_{l=0}^m [k_2 n_l \pmod{k_1}] k_1^{-(l+1)} - \frac{1}{2} \tag{21}$$

从定义可以看出, Van der Corput 随机数序列是区间  $[-1/2, 1/2]$  内均匀分布的非随机序列。

表 1 Chorin 数的统计量

Table 1 Statistical quantities of Chorin's generator

$N_0$	$m_1$	$m_2$	$\bar{x}$	e	$i^2$
2	1	2	+ 0.0122	16.39	26.2
	2	3	- 0.0067	16.17	19.0
	1	3	- 0.0004	17.12	18.8
	1	5	+ 0.0060	16.25	21.4
3	7	- 0.0002	16.85	16.8	
5	3	5	- 0.0029	16.37	19.0
7	11	+ 0.0009	16.92	6.0	

表 2 Van der Corput 数的统计量

Table 2 Statistical quantities of Van der Corput's generator

$k_1$	$k_2$	$\bar{x}$	e	$i^2$
2	1	- 0.0054	16.60	1.5
3	2	- 0.0033	16.48	1.0
3	1	- 0.0054	16.50	1.0
5	1	- 0.0063	16.64	2.6
9	3	- 0.0040	16.55	1.0
5	3	- 0.0040	16.63	0.8
11	7	- 0.0009	16.53	1.0

Olivier<sup>[6]</sup> 根据平均值  $\bar{x}$ , 标准方差 e 值和统计量  $i^2$  比较两个序列的均匀性。表 1 和表 2 给出了 Olivier 等的统计量计算结果<sup>[6]</sup>。(本文的随机数与 Olivier 给出的相差 1/2) 计算

共取了 200个随机数, 计算  $i^2$ 时分了 20个子区间。两个随机数序列的平均值  $\bar{x}$ 、标准方差  $e$  的差别不明显, 根据它们难以判断序列的优劣。两个序列的统计量  $i^2$ 差别很大, 其中 Van der Corput 数的  $i^2$ 比较小。根据  $i^2$ 的值可以认为 Van der Corput 数的均匀性比 Chorin 数的均匀性好, 用于爆轰计算将会有较小的随机涨落。利用表 2 给出的数据不可能判定  $(k_1, k_2)$  的那一种组合会有更好的计算效果, 这只能通过实际计算来做出判断。

### 5 计算结果

本节给出的结果主要为了验证前两节讨论得到的结论。计算模型限于一维平面多方气体的 ZND 爆轰, 化学反应速率满足 Arrhenius 定律。

为了分析计算结果, 定义随机变量  $\tilde{\lambda}_s^n$  的分布函数如下

$$f(x) = P \{ \tilde{\lambda}_s^n < x \} \tag{22}$$

此处概率  $P$  由条件  $\tilde{\lambda}_s^n < x$  给出。图 3 和图 4 是根据数值计算结果给出的样本数  $N = 20000$  的经验分布函数  $f_N(x)$ 。可以看出, 对于不同的  $V$  和不同的随机数序列, 但是相同的  $\gamma$ , 经验分布函数  $f_N(x)$  基本相同; 对于不同的  $\gamma$ , 则分布函数  $f_N(x)$  有明显差别。这一结果与从 (16) 式得到的结论一致。

另一个重要的统计量是  $\tilde{\lambda}_s^n$  的平均值

$$\bar{\lambda} = \frac{1}{N} \sum_{s=1}^N \lambda_s^n \tag{23}$$

图 5 给出计算得到的  $\bar{\lambda} - \gamma$  曲线。从图可见这些曲线几乎都是直线, 不同的  $V$  和不同的随机数序列给出的  $\bar{\lambda} - \gamma$  直线差别很小, 这也证实  $\gamma$  是影响  $\lambda$  随机涨落的主要参数。

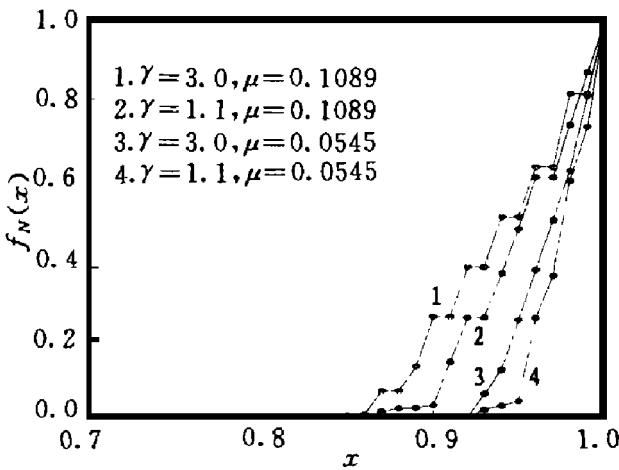


图 3 采用 Van der Corput 数计算得到的经验分布函数

Fig 3 Empirical distribution function by Van der Corput's generator

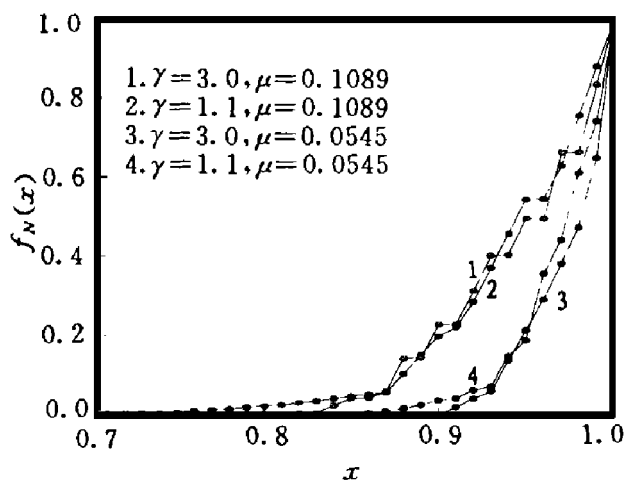


图 4 采用 Chorin 数计算得到的经验分布函数

Fig 4 Empirical distribution function by Chorin's generator

从图 5 的结果还可以看出, 对于相同的  $V$ , Chorin 数给出的  $\bar{\lambda}$  小于 Van der Corput 给

出的相应值。由于两种情况给出的  $\bar{\lambda}$  值相差很小, 为了更确切地判断随机数序列对参数涨落的影响, 图 6 给出同一模型采用相同计算参数和不同随机数序列的爆速-时间曲线计算结果。从计算结果不难看出, 使用 Van der Corput 数得到的结果比 Chorin 数给出的涨落小, 这就进一步证实前者的均匀性优于后者, 有比较好的计算结果。

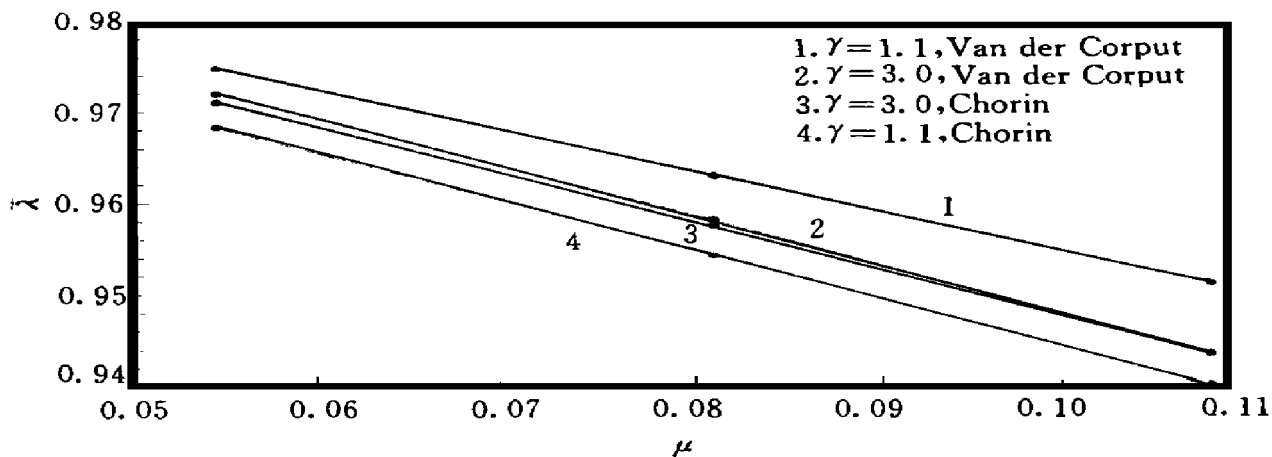


图 5  $\bar{\lambda}$  - 曲线

Fig 5 Curve of  $\bar{\lambda}$

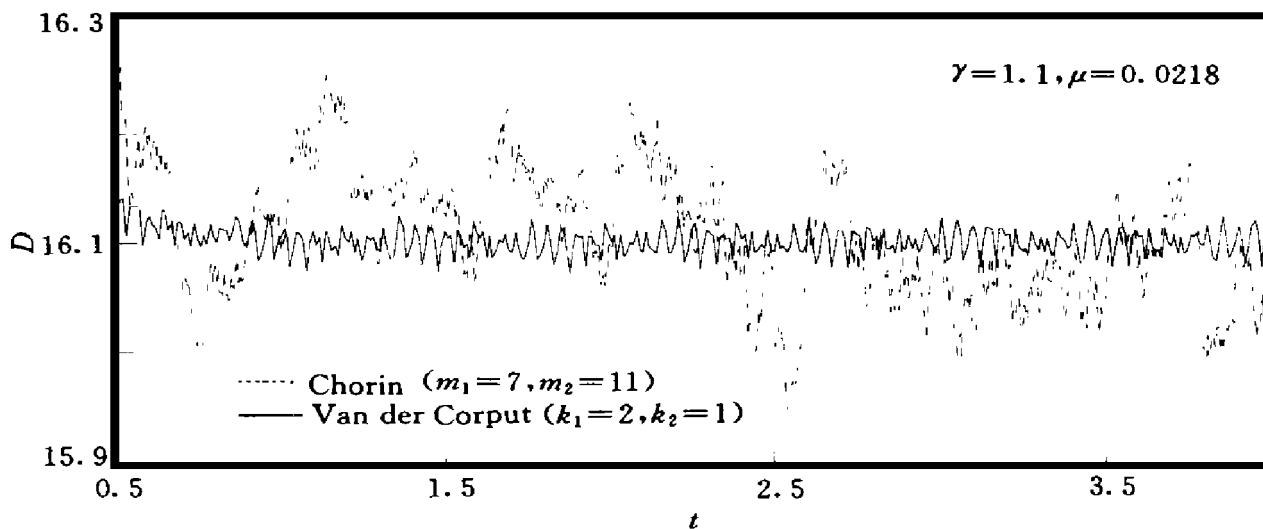


图 6 不同随机数序列计算得到的爆速-时间曲线

Fig 6 Detonation speed-time curve by several random number generators

参 考 文 献

- 1 Glimm J Solutions in the Large for Nonlinear Hyperbolic Systems of Equations Comm Pure Appl Math, 1965, 18(4): 697~ 715
- 2 Chorin A J Random Choice Solution of Hyperbolic Systems J Comput Phys 1976, 22(4): 517~ 533

- 3 Sod G. A. A Numerical Study of a Converging Cylindrical Shock. *J Fluid Mech*, 1977, 83(4): 785~794
- 4 Chorin A. J. Random Choice Methods with Application to Reacting Gas Flow. *J Comput Phys*, 1977, 25(3): 253~272
- 5 Bukiet B. The Effect of Curvature on Detonation Speed. *SIAM J Appl Math*, 1989, 49(5): 1433~1446
- 6 Olivier H., Gronig H. The Random Choice Method Applied to Two-dimensional Shock Focusing and Diffraction. *J Comput Phys*, 1986, 63(1): 85~106

## PARAMETER FLUCTUATION OF DETONATION IN CHEMICAL FLOW BY RANDOM CHOICE METHOD

Chen Senhua, Bo Jingsong

(*Institute of Fluid Physics, CAEP, Chengdu, 610003*)

**ABSTRACT** The computational result RCM (Random Choice Method) may be spurious because of large fluctuations of the parameters, so to grasp the factors effecting the random fluctuations is the key of selecting computational parameters to obtain correct results. The fluctuations of different parameters are interrelated, so far as such factor of the random fluctuation of mass fraction of unburnt explosive is grasped, the fluctuations of other parameters can be understood. In this paper, the factors effecting the fluctuation of mass fraction of unburnt explosive and the computation examples verifying the conclusions are presented.

**KEY WORDS** aerodynamics, detonation, numerical simulation, random choice method