

文章编号: 1001-1455(2008)05-0401-06

以 DSD 理论和 LS 方法为基础的程序燃烧法*

柏劲松^{1,2}, 李 平^{1,2}, 钟 敏², 张展冀², 袁 帅², 姜 洋², 陈森华²

(1. 中国工程物理研究院流体物理研究所冲击波物理与爆轰物理实验室, 四川 绵阳 621900;

2. 中国工程物理研究院流体物理研究所, 四川 绵阳 621900)

摘要: 给出了二维弯曲爆轰波后产物流场计算方法。爆轰波阵面传播规律满足 Detonation Shock Dynamics (DSD) 理论并用 level set (LS) 方法计算, 波阵面传播规律与波后流场的耦合通过程序燃烧法实现, 反应进程变量可作为 LS 函数的函数给出。爆轰波从刚性细管道向粗管道传播产生绕射的二维计算结果表明, 化学反应速率不影响波后流场分布, 只影响反应区结构。此方法可用于钝感炸药的驱动计算问题。

关键词: 爆炸力学; 程序燃烧法; LS 方法; 非理想爆轰

中图分类号: O381

国标学科代码: 130 · 3510

文献标志码: A

1 引 言

曲面爆轰波阵面传播速度受反应区厚度的影响, 为了在计算产物流场时爆轰波阵面具有正确的传播规律, 最直接的方法是在化学反应区内进行化学流体动力学计算。这种计算有 2 个苛刻的要求, 首先必须有正确描述化学反应区物态和化学反应的参数, 其次必须划分很细的网格才能给出正确的爆速和确保化学反应区内各种参数有足够分辨率。在流场远大于反应区宽度的情况下, 利用这种算法计算爆轰产物流场参数, 网格划分过细, 花费太多的 CPU。对于某些只关心波后大范围流场参数, 而不关心化学反应区结构的问题, 例如爆轰产物驱动飞片, 使用程序燃烧法耦合波阵面传播规律计算和波后爆轰产物流场计算, 无疑是最简便和有效的方法。这种方法不仅可以使使用粗网格, 而且不需要使用实验很难测准的化学反应区内物态参数和化学反应参数, 仅需要使用实验容易测到的爆速曲率关系。B. G. Bukiet^[1]指出使用 Huygens 原理的传统程序燃烧法, 计算会产生给定燃烧波与计算产生流体动力学波分离的现象, 对会聚强爆轰问题更严重。陈森华等^[2]指出, 利用精确爆轰波传播规律(考虑化学反应由高阶格式计算的结果)代替 Huygens 原理给出的传播规律, 程序燃烧法计算得到会聚爆轰波后的流场参数, 没有出现波的分离现象, 计算结果与直接化学流体动力学的计算结果在 Taylor 波区内符合得很好, 化学反应区的计算结果差别稍大一些。该算法的基本特点是构造一个人工的化学反应速率代替真实反应速率, 反应进程变量仅是流体质点距爆轰波阵面的线性函数, 反应区宽度是一个经验常数, 流体动力学计算采用二阶 TVD 格式。J. B. Bdzil 等^[3]也在一维情况研究了根据 DSD 理论给出的曲面波轰波传播规律的程序燃烧法, 所采用的人工化学反应速率函数与文献^[2]中的类似。

T. D. Aslam 等^[4]根据爆速度曲率关系推得了波阵面传播时波阵面 LS 函数满足的 Halmiton-Jacobi 方程, 并给出了直角坐标系中求解 Halmiton-Jacobi 方程的 ENO 差分格式。王春武等^[5]在多介质流体界面方面成功运用了 LS 方法。由于爆轰波阵面一般并非封闭曲面, 在波阵面边沿处需要加入保证边侧稀疏不进入反应区的声速条件。对于边界为曲面的炸药, 边界一般不可能离散为直角坐标系的网格节点, 处理边界条件很不方便, 特别对于三维情况困难更大。采用四边形贴体坐标, 便于边界条件的处理^[6]。T. J. Barth 等^[7]给出了利用三角网格解 Halmiton-Jacobi 方程的方法, 这种方法也可用于解爆轰波传播规律的数值算法。三角网格虽然便于描述复杂的曲面边界, 但精度较低, 并且不易编程。

* 收稿日期: 2007-04-05; 修回日期: 2007-06-29

基金项目: 国家自然科学基金项目(10672151); 中国工程物理研究院科学技术发展基金项目(2008B0202011)

作者简介: 柏劲松(1968—), 男, 博士, 副研究员。

文献[2-3]中仅给出了一维情况的算法,本文中给出以 DSD 理论为基础的多维情况波阵面传播计算和利用程序燃烧法实现与波后流场耦合计算的方法,利用 LS 函数直接构造人工化学反应率函数,他们之间的关系率采用幂函数形式,通过变化幂的数值在二维情况研究化学反应速率对波阵面结构和波后流场的影响。由于化学反应速率不真实,利用本文中所给的方法不可能得到正确的反应区结构,但是研究结果证实了本文中给出的方法应用于大范围流场计算的合理性,程序燃烧法能够实现波阵面和波后流场的耦合。

2 LS 方程和 DSD 理论

计算可分解为 3 部分:爆轰波阵面传播规律计算、反应进程变量计算、波后流场的流体动力学计算。因此基本方程也包含 3 部分方程。

令 $\Psi=0$ 是爆轰波阵面坐标满足的方程,并假定 $\Psi>0$ 是炸药未反应区, $\Psi<0$ 是化学反应区和爆轰产物区。在初始时刻 LS 函数 Ψ 一般取为到波阵面的距离函数。爆轰波阵面传播时,LS 函数 Ψ 应当满足 Halmiton-Jacobi 方程

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} + D_n |\nabla \Psi| = 0 \quad (1)$$

式中: D_n 是 LS 曲面沿外法线方向 \mathbf{n} 的传播速度。根据 DSD 理论, $D_n = D_n(\kappa_0)$ 为爆轰波阵面传播速度,即爆速曲率关系

$$D_n(\kappa_0) = D_J + \alpha(\kappa_0) \quad (2)$$

式中: D_J 是 C-J 爆速, $\alpha(\kappa_0) \ll D_J$, κ_0 为 $\Psi=0$ 波阵面的中值曲率,是 Ψ 一阶和二阶导数的函数。 $D_n(\kappa_0)$ 只有在爆轰波阵面上有确定的物理意义。不影响一般性,流场中其他部分 D_n 可按以下方法拓展:取所在点的 LS 曲面($\Psi=C \neq 0$)中值曲率 κ 代替爆轰波阵面中值曲率 κ_0 ,代入式(2)得到所在点 $D_n(\kappa)$ 。

波阵面与惰性介质交界面处 Ψ 满足的边界条件为

$$\prod (\beta) \leq 0 \quad (3)$$

式中: β 为波阵面与惰性介质表面的夹角。

程序燃烧法的主要特点是,根据已知的波阵面位置构造一个人工反应速率代替真实反应速率。为了避免对时间的积分,以化学反应分数作为反应进程变量,它的数值由以下反应率函数给出

$$\lambda(d) = \begin{cases} 1 & d < -d_c \\ \Lambda(d) & -d_c \leq d \leq 0 \\ 0 & d > 0 \end{cases} \quad (4)$$

式中: d 为所在点到波阵面的符号距离, $d<0$ 表示点在反应区内, $d=0$ 表示点在爆轰波阵面上, $d>0$ 表示点在未反应炸药内; $d_c>0$ 是人工反应速率确定的反应区宽度;函数 Λ 满足性质

$$\Lambda(0) = 0 \leq \Lambda(x) \leq \Lambda(-d_c) = 1 \quad 0 \geq x \geq -d_c$$

$$\Lambda(x_1) < \Lambda(x_2) = 0 \quad 0 \geq x_1 \geq x_2 \geq -d_c$$

爆轰产物流场内满足流体动力学方程组

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \\ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p \\ \frac{d}{dt} (e - \lambda Q) + p \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\rho} \right) = 0 \end{cases} \quad (5)$$

式中: λ 是化学反应的进程变量, Q 是炸药的反应热(常数)。状态方程为

$$p = f(\rho, e) \quad (6)$$

3 贴体坐标系中 LS 方程求解和阵面曲率计算

引进坐标变换

$$\xi = F(x, y), \quad \eta = G(x, y) \tag{7}$$

其中变换应满足 2 个基本要求：(1) 为了保证逆变换存在，应当有 Jacobi 行列式 $J = D(\xi, \eta)/D(x, y) \neq 0$ ；(2) 在计算空间 (ξ, η) 边界即炸药边界上，应当有 $\xi = \text{constant}$ 或 $\eta = \text{constant}$ ，使计算区域是矩形。

利用变换(7)可求得

$$|\nabla \Psi|^2 = H_1^2 \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \xi} \right)^2 + 2H_1 H_2 \cos \varphi \frac{\partial \Psi}{\partial \xi} \frac{\partial \Psi}{\partial \eta} + H_2^2 \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \eta} \right)^2 \tag{8}$$

式中： $H_1 = \sqrt{(\partial F/\partial x)^2 + (\partial F/\partial y)^2}$ ， $H_2 = \sqrt{(\partial G/\partial x)^2 + (\partial G/\partial y)^2}$ ； φ 为 ξ 线与 η 线切向夹角。变换(7)可利用现有的曲边四边形网格生成器以数值解给出，方程(8)满足边界条件(3)的解可以用二阶 ENO 格式求得。

对于波阵面上曲率，采用 LS 函数 Ψ 进行计算。定义 Ψ 为距离函数， A 是任一 LS 曲面上的点，过 A 点的法线与另一 LS 曲面相交于 B 点， AB 是两曲面的公共法线。两曲面在 A, B 具有共同曲率中心。对于平面曲线，曲率半径满足关系 $\rho_A = \rho_B + AB$ ；对于曲面，两个曲面的所有法截面曲率半径都满足此关系，可以推得

$$\kappa_A = \kappa_B [1 - 2\kappa_B (\mathbf{n} \cdot \mathbf{BA}) + O((\kappa_B (\mathbf{n} \cdot \mathbf{BA}))^2)] \tag{9}$$

D. Adalsteinsson 等^[8]指出，如果 $D_n(\kappa)$ 沿法线都是常数，距离函数的性质将保持不变。因此，为了保证距离函数的性质不变，每一法线上的 D_n 都是波阵面上对应的爆速，即在 $D_n(\kappa)$ 中应将 κ 换为同一法线上的 κ_0 ，式(2)变换为

$$D_n(\kappa) = D_j + \alpha [\kappa(1 + 2\kappa\Psi)] \tag{10}$$

在进行窄带计算时，增加新网格等都可能使 Ψ 偏离距离函数，这时还必须对 Ψ 做重新初始化处理。

4 阵面-流场耦合计算

方程(1)和(2)只包含一个未知变量 Ψ ，不包含其他流体动力学参数，因此可以独立于式(4)~(6)在只包含整个炸药的区域内求解，编制具有通用性的程序。方程(5)和(6)中，如果 λ 是时间和坐标的已知函数时，方程组也可以独立求解。坐标系和差分格式根据包括惰性介质的整个流场特点来选定，可以利用现有流体力学程序。两部分计算的衔接可以通过以下方式来实现：方程(1)和(2)的解 Ψ 插值到方程(5)和(6)计算坐标系的网格节点上，利用式(4)计算 λ 。只要能够确定波阵面位置， Ψ 可以是任意满足 Halmiton-Jacobi 方程的函数。但是为了便于确定 λ ，取 Ψ 为距离函数： $\Psi = d$ 。因此在解得 Ψ 后，计算 λ 时，必须进行重新初始化。 $\Lambda(x)$ 具有任意性，选用以下定义最方便

$$\lambda = \Lambda(d) = (-d/d_c)^n \quad 0 \geq d \geq -d_c \tag{11}$$

式中： n 和 d_c 是经验确定的参数。

5 计算实例

从图 1 给出的弯曲管道中弯曲爆轰波传播时的波形(计算采用第 3 节中的方法)看出，波阵面上没有不真实的震荡，左侧面绕射区和右侧面正规反射区波阵面

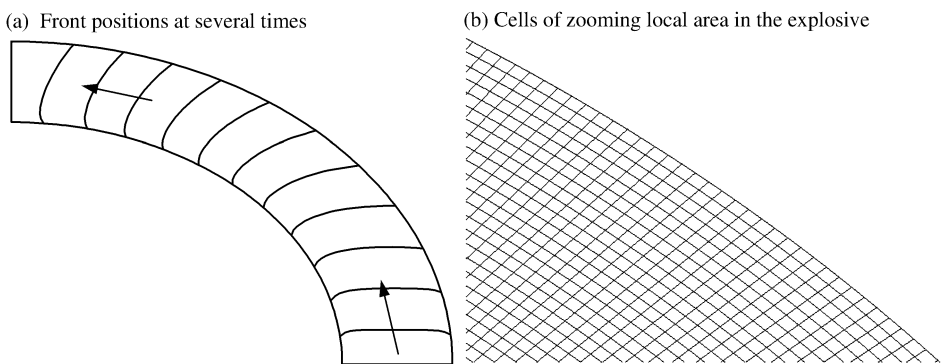


图 1 弯曲边界炸药中的非理想爆轰波

Fig. 1 Non-ideal detonation front in the explosive with curve surfaces

的物理图像都很合理。从局部网格的形状可看出网格有明显的非正交性。

耦合计算的算例是气体爆轰波从刚性细管道向粗管道传播的绕射问题,计算模型分成 3 个子区域: $[0,20] \times [0,20]$ 、 $[20,100] \times [0,20]$ 和 $[20,100] \times [20,100]$,初始条件为

$$(p, \rho, u, \lambda) = \begin{cases} (p_0, \rho_0, u_0, \lambda_0) & x < 5.0 \\ (p_j, \rho_j, u_j, \lambda_j) & x \geq 5.0 \end{cases} = \begin{cases} (100, 1.4, 0, 1) \\ (220.511, 2.096, 5.345, 0) \end{cases}$$

爆速曲率关系为 $D_n(\kappa) = D_j - \alpha\kappa = 16.094 - 73.602\kappa$ 。取两种计算网格,主要参数分别为: $\Delta x = \Delta y = 0.5$ 和 $\Delta x = \Delta y = 0.25$,反应区宽度 $d_c = 4$,则反应区内的分点分别为 8、16 个网格点;每一种反应区宽度 (11) 式的幂 n 取 3 种值,即 $n = 0.5, 1.0, 1.5$ 进行计算。边界条件在 $x = 0$ 处,流体力学计算取穿透边界条件,其他部分取刚性壁边界条件。流体力学计算使用的差分格式为二阶 Godunov 格式。

图 2 给出了 2 种网格尺寸下由 LS 方法计算得到的波阵面形状;图 3 是 3 种人工化学反应率指数给出的反应进程量 λ ;图 4 是粗、细网格和 3 种人工化学反应率指数情况下计算得到的流场中压力等位线;图 5~6 给出了流场中截面 $y = 0$ 和 $x = 20$ 上的压力分布。

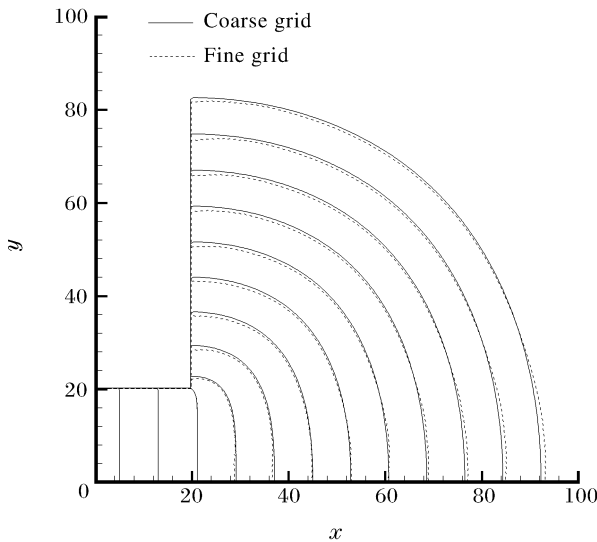


图 2 不同时刻爆轰波阵面位置

Fig. 2 Detonation-front positions at different times

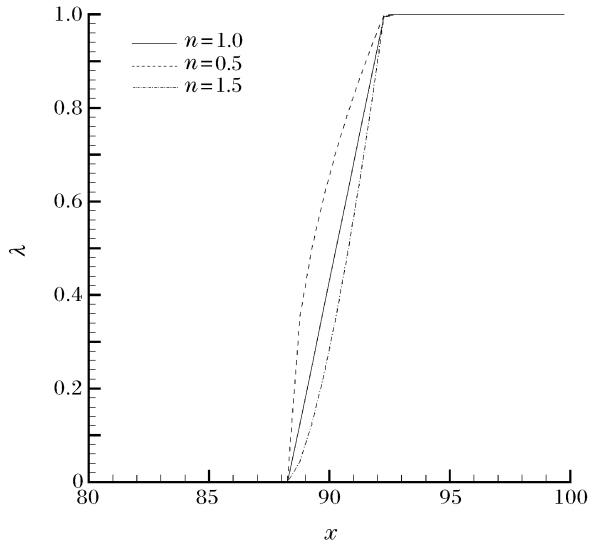


图 3 三种反应进程变量的分布

Fig. 3 Variable distribution for three reaction processes

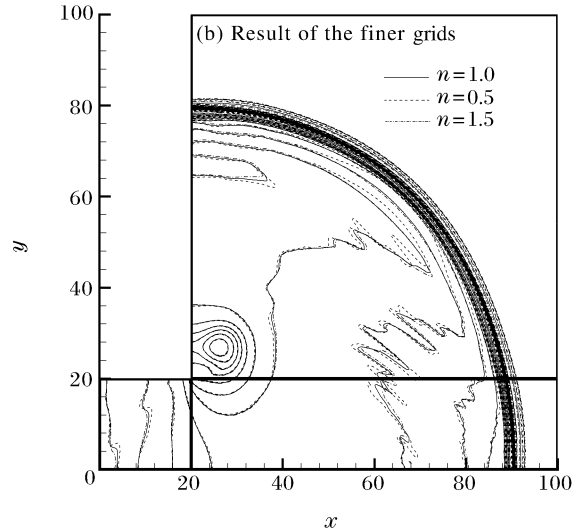
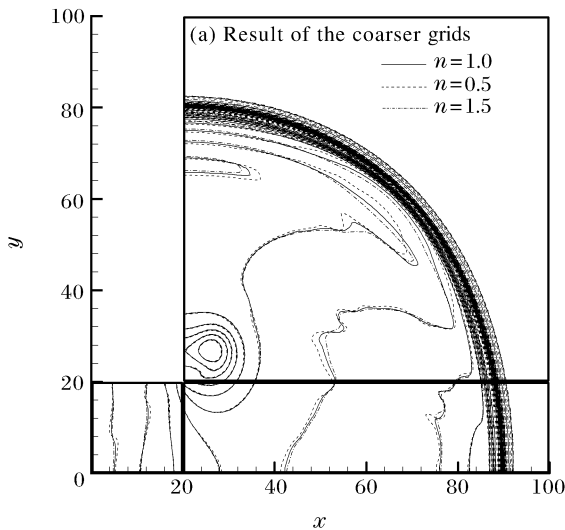


图 4 粗、细计算网格下三种反应进程变量下的压力分布

Fig. 4 Pressure distribution of the three reaction processes with coarser and finer grids

从计算结果中可以看出,对于不同的参数 n ,压力仅在化学反应区有差别,在波后产物流场中符合得很好。不同的参数 n 体现了不同的化学反应速率,所以这些计算结果证实不真实的化学反应速率并不影响波后的流场参数,大范围流场参数只受产物状态方程和爆热的影响。

从图 5~6 给出的流场压力分布可见,不同的化学反应速率对反应区的前界面(压力起跳点)几乎没有任何影响,而对于波阵面却带来较大的影响,压力从反应区前界面的波前值增大到各自峰值的历程随参数 n 的不同而不同,参数 n 越大,压力峰值位置距离反应区前界面越近;从波阵面上峰值压力来看,波阵面的峰值压力随参数 n 的增大而减小,同时峰值压力减小的幅度随参数 n 的增大也明显减小。可见,虽然不同化学反应速率对波阵面产生了影响,但这种影响并未对波后流场参数产生影响,这说明波阵面传播与波后流场的耦合是可以通过不真实的化学反应速率来实现的。

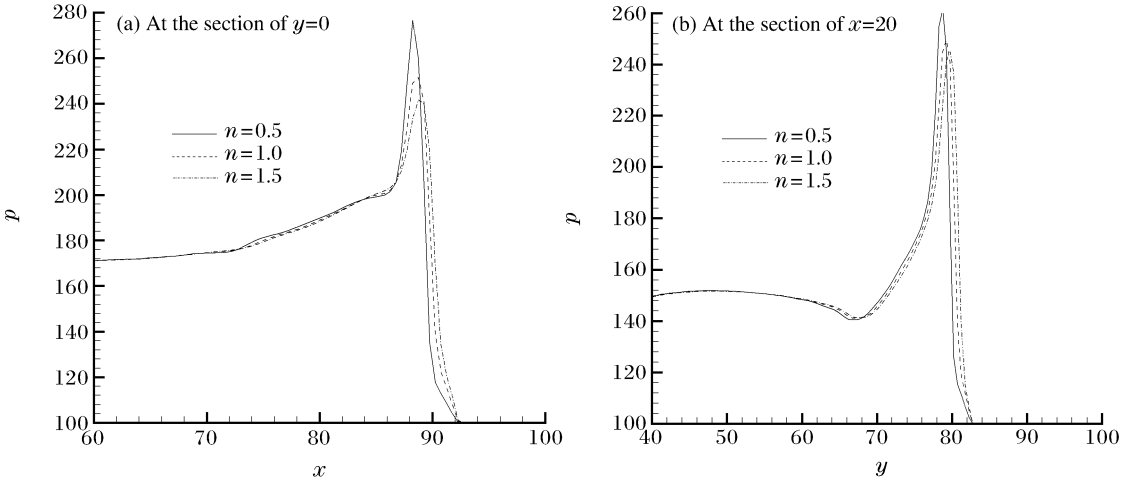


图 5 粗网格下两个截面上的压力分布

Fig. 5 Pressure distribution on the two sections with coarser grids

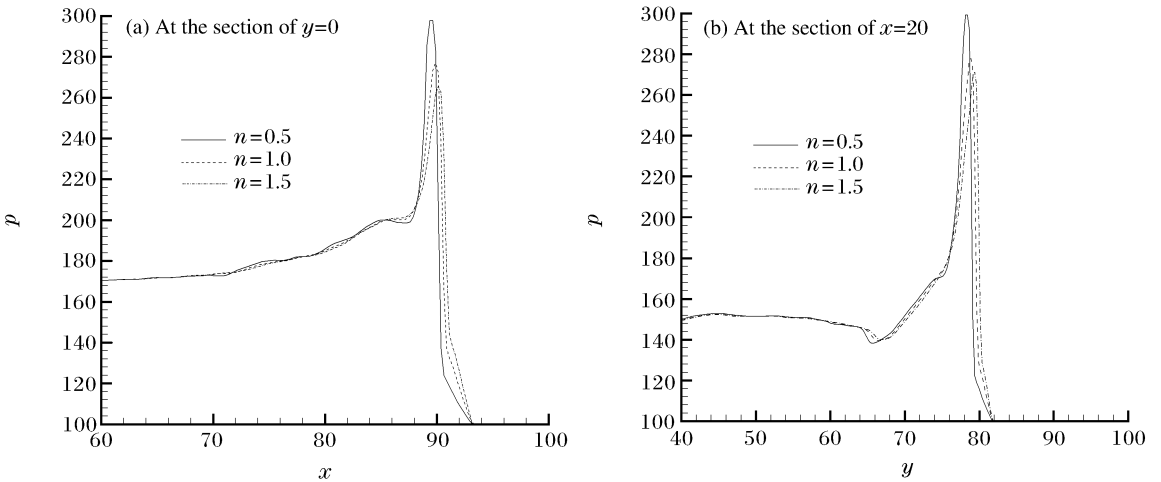


图 6 细网格下两个截面上的压力分布

Fig. 6 Pressure distribution on the two sections with finer grids

6 结论

对于敏感炸药,反应区很薄,波速将认为是 CJ 爆轰,波速不变。在粗网格情况下采用程序燃烧法,反应区会被人为夸大,但是计算结果能够满足工程计算的需要。对于钝感炸药,具有比敏感炸药更宽的化学反应区,反应区被夸大的程度可能不如敏感炸药,因此以 DSD 理论和 LS 方法为基础的程序燃烧法同样可用于钝感炸药爆轰驱动问题。

参考文献:

- [1] Bukiet B G. Understanding curved detonation waves[C]//Proceedings of the 10th International Detonation Symposium, Boston, 1993:19-26.
- [2] 陈森华, 柏劲松, 李平. 非理想爆轰产物的程序燃烧计算法[J]. 爆炸与冲击, 1999, 19(1):1-6.
CHEN Sen-hua, BAI Jing-song, LI Ping. A programmed burning method for computing flow field of detonation products behind nonideal detonation wave[J]. Explosion and Shock Waves, 1999, 19(1):1-6.
- [3] Bdzil J B, Stewart D S, Jackson T L. Program burn algorithms based on detonation shock dynamics: Discrete approximations of detonation flows with discontinuous front models[J]. Journal of Computational Physics, 2001, 174(2):870-902.
- [4] Aslam T D, Bdzil J B, Stewart D S. Level set methods applied to modeling detonation shock dynamics[J]. Journal of Computational Physics, 1996, 126(2):390-409.
- [5] 王春武, 赵宁. 二维多介质流动问题的界面处理方法[J]. 南京航空航天大学学报, 2005, 37(1):114-116.
WANG Chun-wu, ZHAO Ning. Interface treating method for 2-D multi-medium flow[J]. Journal of Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 2005, 37(1):114-116.
- [6] 陈森华, 张旭, 柏劲松. 贴体坐标系中多维非理想爆轰波阵面传播计算的 LS 方法[J]. 高压物理学报, 2000, 14(4):280-284.
CHEN Sen-hua, ZHANG Xu, BAI Jing-song. LS method in body-fitted coordinate system for multi-dimensional non-ideal detonation propagation[J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2000, 14(4):280-284.
- [7] Barth T J, Sethian J A. Numerical schemes for the Hamilton-Jacobi and level set equations on triangulated domains [J]. Journal of Computational Physics, 1998, 145(1):1-40.
- [8] Adalsteinsson D, Sethian J A. The fast construction of extension velocities in level set methods[J]. Journal of Computational Physics, 1999, 148(1):2-22.

A program burn method based on detonation shock dynamics and level set (LS) methods

BAI Jing-song^{1,2*}, LI Ping^{1,2}, ZHONG Min², ZHANG Zhan-ji²,
YUAN Shuai², JIANG Yang², CHEN Sen-hua²

- (1. *Laboratory for Shock Wave and Detonation Physics Research, Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, Sichuan, China;*
2. *Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, Sichuan, China*)

Abstract: Algorithms for the flow field of detonation products behind 2D curved detonation waves are given. Detonation propagation is described by detonation shock dynamics, and detonation front positions are computed by the LS methods. Detonation propagation and coupling between the detonation front and the flow field of detonation products behind the detonation front are calculated by a program burn method, in which the reaction process variable is defined by the LS functions. Calculated results for 2D detonation wave diffraction from a rigid finer tube to a coarser tube show that chemical reaction rates do not influence the flow field distribution behind the detonation front, only affects the reaction zone structure. The proposed method can deal with the driven problems of insensitive explosives.

Key words: mechanics of explosion; program burn method; LS method; non-ideal detonation

* Corresponding author: BAI Jing-song
E-mail address: bjsong_mail@212cn.com
Telephone: 86-816-2485109