

第二次全国爆轰学术讨论会

论文集

(1)

中国力学学会爆炸力学委员会

一九八三年十一月 南京

03-6/21
说 明

第二次全国爆轰学术讨论会于一九八三年十一月在南京华东工程学院召开，由于从事爆轰理论，爆炸物理，测试技术与炸药应用等方面科学技术人员的重视与支持，已收到论文66篇，现分装成合订本作为会议交流资料。

论文合订本分为三册，内容大致分为：

第一册 爆轰理论与爆轰的数值计算

第二册 冲击波起爆，状态方程与爆轰的作用

第三册 非均相炸药与测量技术

由于时间仓促，编目可能有不当之处，请读者批评指正。

少数论文份数不够，合订本中可能有缺页请原谅。

第二次全国爆轰学术讨论会

筹 备 组

41878 一九八三年十月

第二次全国爆轰学术讨论会论文合订本

第一册 目录

- | | |
|--------------------------------------|--------------------|
| 1. 爆轰的数值模拟 | 李德元 |
| 2. 我国爆轰学研究的进展 | 周复方 |
| 3. 非均质凝聚炸药冲击波起爆的数值模拟 | 王诚洪、张志杰 |
| 4. 凝聚炸药冲击起爆和爆轰波传播的数值模拟 | 毕 祝、孙义亭 |
| 5. 凝聚炸药受冲击波起爆后流场分布的拉格朗日分析与计算 | 浣 石 |
| 6. 散心临界冲击引爆问题 | 曹菊珍 |
| 7. 起爆过程的微扰解 | 秦承森 |
| 8. 散心爆轰波的数值模拟 | 李伟知、刘帮第 |
| 9. 散心爆轰波及其结构 | 孙锦山 |
| 10. 爆轰计算中的压力振荡及克服方法 | 戴眼双、秦承森、余金炉 |
| 11. 不正常爆轰波的基本关系式及反应率 | 李维新 |
| 12. 带化学反应率的活动网格法 | 袁国兴、郑春琼、张玉华
段庆生 |
| 13. 爆轰的二维推体 | 王继海 |
| 14. 马赫爆轰波的研究 | 恽寿榕、张俊秀 |
| 15. 一维不正常爆轰波的分析解与其应用
——从引爆到稳定的爆轰波 | 曾雄飞 |
| 16. F A E 爆轰参数的计算方法及其程序设计 | 惠君明 |

爆炸的数值模拟

李德元

应用物理与计算数学研究所

1983-9

目 录

引 言

一、爆轰数值模拟的计算方法.....	3
§ 1. 基本方程组.....	3
§ 2. 流体力学的计算方法.....	5
§ 3. 流体弹塑性模型的计算方法.....	20
§ 4. 人为粘性.....	25
§ 5. 热传导项的计算.....	28
二、化学反应率.....	32
§ 1. 模拟定常爆轰的反应率函数.....	35
§ 2. 模拟不定常爆轰的反应率函数.....	37
三、爆轰数值模拟的主要结果及现状.....	44
§ 1. 爆轰波及其传播的数值模拟.....	45
§ 2. 非定常爆轰及引爆问题的数值模拟.....	53
§ 3. 爆轰波与物质的相互作用.....	60
参考文献.....	66

炸药的爆轰是由局部起爆产生的爆轰波向炸药的其余部分传播来实现的。爆轰波由冲击波及波后的化学反应区组成。冲击波在炸药中激发化学反应，化学反应释放能量、推动前沿冲击波向前传播并引起反应产物及周围介质的运动。而这些运动反过来又影响化学反应动力学的进程。因此，爆轰是流体力学和化学反应动力学相互耦合的一种复杂过程。

爆轰的数值模拟，就是采用合适的计算方法及相应的计算程序，在大型电子计算机上数值求解流体力学和化学反应动力学方程组，以正确反映上述爆轰过程。这对于爆轰理论研究、炸药能量利用，都是十分重要的。高能炸药在军事和国民经济各个领域日益广泛的应用，有力地促进着爆轰学的研究及其数值模拟的发展。大型高速电子计算机的普遍使用及其动能的不断提高，也为爆轰的数值模拟开辟了广阔的道路。目前，爆轰的数值模拟工作愈来愈引起人们的关注，并在爆轰学研究的领域中占据了一个重要的位置。

为了使数值模拟能正确地反映流体运动、化学反应及其相互作用的爆轰过程，必须解决计算方法、化学反应模拟以及状态方程等几个方面的问题。

在爆轰过程中，流体运动的图象是非常复杂的。爆轰波的前沿是冲击波，在爆轰作用下，介质中也会出现冲击波。从四十年代开始发展了计算冲击波的人为粘性方法。成功地解决了冲击波的数值模拟问题。爆轰产物和周围介质在运动中常常经受大的变

形。往往还会出现多种物质交界面，它们在运动中还会发生扭曲。针对所要模拟的具体问题，常常要选用跟随流体运动的 Lagrange 网格或不动的 Euler 网格或者是它们的组合。在爆轰的作用下，周围固体介质的运动常常要用流体弹塑性模型来描绘，因而必须发展相应的计算方法。有时，在爆轰过程还必须考虑流体的热传导，因而也要研究热传导问题的计算方法。关于爆轰数值模拟中的这些计算方法问题，我们将在本文的第一部分中论述。

凝聚态炸药爆轰过程中“化学反应问题是十分复杂的。存在着多种化学反应道。在非均质炸药中，激发化学反应的机制更是多种多样的。许多有关问题尚待进一步研究清楚。在目前的条件下，要准确地模拟爆轰中的化学反应动力学过程是十分困难的。人们只好采用一些唯象的模型，考虑简单的化学反应道，把反应速率函数看成是热力学变量的函数，而忽略各种细致的过程。由于缺乏理论根据，目前在爆轰的数值模拟中所使用的反应速率函数的形式也是各式各样的。这些函数中的一些参量，都是根据某些实验数据确定的。因此，它们的适用性也往往和实验条件有关。此外，为了求解流体力学和化学反应相耦合的方程组，还需要给出各种物质中表征热力学量之间关系的状态方程，特别是炸药、爆轰产物及其混合物的状态方程。在爆轰的数值模拟中，常常使用 JWF 状态方程和 H O M 状态方程。在本文的第二部分我们将介绍常用的反应率函数及相应的状态方程。

最后，我们将简要的介绍一些爆轰课题的数值模拟结果，除了述及一些国外发表的文獻外，还涉及我们所的许多工作，供有关同志参考。

一、爆轰数值模型的计算方法

§ 1. 基本方程组

爆轰数值模拟所使用的基本方程是不定常可压缩理想流体力学方程和化学动力学方程的藕合方程组：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{u} = 0 \quad (\text{质量方程}) \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{u} \vec{u} + \nabla P = 0 \quad (\text{动量方程}) \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot \rho E \vec{u} + \nabla \cdot P \vec{u} = 0 \quad (\text{能量方程}) \quad (1.3)$$

$$E = e + \frac{1}{2} |\vec{u}|^2$$

$$\frac{\partial F}{\partial t} = R(P, e, F) \quad (\text{反应方程}) \quad (1.4)$$

$$P = P(\rho, e, F) \quad (\text{状态方程}) \quad (1.5)$$

在求解这组方程时，计算方法上的难点主要在于求解流体力学方程组 (1.1)——(1.3)；对反应方程 (1.4) 来说求解方程上没有什么困难，主要的问题要提供一个能正确反映化学反应特性的反应率函数 $R(P, e, F)$ 。该函数还可表示为温度 T 的函数 $R(P, T, F)$ 。与一般的流体力学计算不同，这里状态方程中还包含着化学反应度 F 。有时，还必须考虑热传导的影响，这时在方程 (1.3) 的右端还要加上热传导项

$\nabla \cdot Q$, 其中热流 $Q = -\sigma \nabla T$, σ 是热传导系数。

在研究爆轰与固体的相互作用时。若作用在固体上的压力不太大(例如物体碰撞、冲击波在自由面上反射、子弹或射流的穿甲、爆轰产物推体的后期运动等等)。则物体应作弹塑性介质处理。这时。基本方程则应取为弹塑性流体力学方程。简单地说。就是在上述流体力学方程中加上弹塑性考虑。亦即要在方程 (1.2) 和 (1.3) 中把压力换为应力分量。同时引进表征应力应变关系的所谓本构方程。有时。还要引进流体的粘性。具体地说。就是要把方程 (1.1) —— (1.3) 换为下列方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{u} = 0 \quad (1.6)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{u} \vec{u} + \nabla P = \nabla \cdot \vec{\tau} \quad (1.7)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot \rho E \vec{u} + \nabla \cdot P \vec{u} = \vec{\tau} : \nabla \vec{u} \quad (1.8)$$

其中 $\vec{\tau}$ 是粘性应力张量 $\vec{\tau}^1$ 与应力偏量张量 $\vec{\tau}^2$ 之和:

$$\vec{\tau} = \vec{\tau}^1 + \vec{\tau}^2$$

粘性应力张量为

$$\tau'_{ij} = \lambda \dot{E}_{kk} \delta_{ij} + 2\mu \dot{E}_{ij}$$

λ 是第一粘性系数, μ_y 为粘性系数。根据 $s + \sigma_K + s$ 关系有

$$\lambda + \frac{2}{3} \mu_y = 0$$

$\dot{\epsilon}$ 是应变率:

$$\dot{\epsilon}_{kk} = \nabla \cdot \vec{u}, \quad \dot{\epsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

应力偏量张量为

$$\vec{\tau} = \begin{pmatrix} s_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & s_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & s_{zz} \end{pmatrix}$$

其中各分量由本构方程即广义虎克定律和屈服条件决定。具体形式将在后面给出。

由上看到, 在爆轰的数值模拟中, 将涉及到下列几方面的计算:

1) 流体力学方程; 2) 弹塑性流体力学方程; 3) 人为粘性; 4) 热传导; 5) 反应率函数。本章将分别介绍 1) — 4) 的计算方法。至于反应率函数将在第二章中专门介绍。

§ 2. 流体力学的计算方法

爆轰的数值模拟, 其中包括需采用流体弹塑性方程 (1.6) — (1.8) 的数值计算。就计算方法而言, 其主要困难是在

流体力学方程 (1.1) —— (1.3) 上。对方程 (1.6) —— (1.8) 的计算, 可以采取分步的办法: 第一步先计算流体力学方程 (有时, 对流体力学方程的计算又分成若干步), 第二步再考虑弹塑性的影响。因此, 我们先着重介绍流体力学的计算方法。上述分步计算的做法, 在流体力学计算中是普遍采用的。下面以一个二步法为例来说明这种分步的计算方法。设有不定常偏微分方程组

$$\frac{\partial u}{\partial t} = A u \quad (1.9)$$

其中 A 是一个对空间变量的偏微分算子。现将 A 分解为两个算子之和

$$A = A_1 + A_2$$

设 L_1, L_2 分别是与 A_1, A_2 相容的差分算子, 则方程 (1.9) 的差分格式可写成

$$\begin{aligned} \frac{u - u^n}{\Delta t} &= L_1 u^n \\ \frac{u^{n+1} - \tilde{u}}{\Delta t} &= L_2 \tilde{u} \end{aligned} \quad (1.10)$$

从格式中消去中间量 $\tilde{u}$, 得

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = L_1 u^n + L_2 (I + \Delta t L_1) u^n$$

~ 6 ~

其中 I 是恒等算子, 整理后可看出, 格式 (1.10) 是与方程 (1.9) 相容的, 而与普通的单步显式格式相比, 增加了 $O(\Delta t)$ 的截断误差项 $\Delta t L, L \propto u^n$ 。

对流体力学方程的计算, 在电子计算机出现以前, 一种有效的计算方法是特征线法。这种方法的计算结果, 物理图象明确清晰, 但是由于其计算逻辑比较复杂, 所以比较适合于手算, 在出现了高速电子计算机之后, 人们普遍采用的是差分方法。下面要介绍的就是这种方法。

1. 一维问题

流体力学方程组 (1.1) — (1.3) 是建立在空间固定的欧拉坐标系中的。有时, 也把它建立在跟踪质团的拉格朗日 (以后简称拉氏) 坐标系中。习惯上, 把求解欧拉坐标系中流体力学方程的方法称为欧拉方法, 而把跟踪质团、解出固体质团上各量变化的方法称为拉氏方法。

由于在一维 (包括平面对称、柱对称、球对称) 运动过程中流体质团是有序的, 即各个质团之间的相对位置在整个运动过程中始终保持不变, 所以, 对一维问题的数值模拟, 拉氏方法是十分有效的。一维流体力学方程组在拉氏坐标系中可写为

$$\frac{\partial R}{\partial r} = \frac{\rho_0}{\rho} \left(\frac{r}{R} \right)^{\alpha-1} \quad (1.11)$$

$$\frac{\partial R}{\partial t} = u \quad (1.12)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = - \frac{1}{\rho_0} \left(\frac{R}{r} \right)^{\alpha-1} \frac{\partial P}{\partial r} \quad (1.13)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -P \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\rho} \right)$$

其中 ρ_0 是任意选取的具有密度量的参量, $\alpha = 1, 2, 3$ 分别对应平面、柱面、球面对称的情况。方程 (1.11) 是欧拉坐标 R 与拉氏坐标 r 之间的坐标变换关系式, 它是根据质量守恒原则建立的, 所以它在这里同时代表质量守恒方程。由 (1.11) 还可以导出质量方程的另一表达形式:

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{\rho} = - \frac{1}{\rho_0 r^{\alpha-1}} \frac{\partial}{\partial r} R^{\alpha-1} u = 0 \quad (1.15)$$

拉氏方法有许多优点。由于方程形式比较简单, 所以容易建立精确度较高而又稳定的格式。对于描述局部图象, 可以将网格分细而得到较为精确的结果。特别是, 由于这种方法是跟踪质团的, 所以适合于计算多种介质的系统, 能使不同介质之间的界面保持清晰, 自由面的处理也较容易。最早的流体力学数值方法, 著名的 Von Neumann-Richtmyer⁽¹⁾ 格式, 就是解方程 (1.11) —— (1.14) 的拉氏方法。这种方法对很多一维流体力学问题的计算都是合适的。

我们用来计算一维爆轰的程序共有三个, 也都是采用 Von Neumann-Richtmyer 格式。只是用的反应率函数不一样。一个是模拟定常爆轰的, 反应率函数取 Wilkins 函数, 程序名

称为 VNRW，一个是模拟不定常爆轰的，取 Cochrane 反应率函数，称为 VREC 程序，第三个也是模拟不定常爆轰的，有六种不同的函数，程序代号为 VNRU。美国 Los Alamos 实验室早期用来计算爆轰的流体弹塑方程的 SIN 程序，也是拉氏方法。在这些差分格式中，离散化以后的密度、压力、应力、内能诸状态量，都取在网格的中心，而速度取在网格的结点上。流线方程当然也建立在网格的结点处。对空间的导数都取中心差分，因而格式的精确度对空间步长是二阶的。

在解一维流体力学方程的欧拉方法中，较有特色的是苏联的 Гогыноб⁽²⁾ 方法 (1959)。以一维平面情况为例，Гогыноб 从积分形式的流体力学守恒方程出发：

$$\oint_{\partial\Omega} \rho dx - \rho u dt = 0 \quad (1.16)$$

$$\oint_{\partial\Omega} \rho u dx - (\rho u^2 + p) dt = 0 \quad (1.17)$$

$$\oint_{\partial\Omega} \rho E dx - (\rho Eu + pu) dt = 0 \quad (1.18)$$

在进行离散化时，将 Ω 取作 (x, t) 平面上的任一网格， $\partial\Omega$ 是它的边界。Гогыноб 格式将力学量离散化后的值都取在空间网格的中心，即所谓半点处： $\rho_{j+\frac{1}{2}}^n, u_{j+\frac{1}{2}}^n, E_{j+\frac{1}{2}}^n, p_{j+\frac{1}{2}}^n$

(以后简称网格值)，从 (1.16) — (1.18) 可以看出，在离散化后的差分格式中，还将出现各力学量在网格边界上的值 ρ_j, u_j, E_j, p_j (简称边界值)。Гогыноб 格式与

一般格式不同之处就在于，它不是用网格边界两侧的网格值加权平均后作为边界值，而是对这两个相邻的网格，进行严格的间断分解（解 Riemann 问题），求出精确的边界值来。Гогноб 方法以后发展为二维方法，曾用来计算许多爆轰和冲击的二维问题，例如冲击波对物体的绕射、球面爆轰波与平板的相互作用、非球形装药的炸药等等。

特别值得一提的是 Glimm⁽⁸⁾ (1965) 曾经利用 Гогноб 格式，在引入一个随机变量后构造了拟线性双曲型守恒律组初值问题的解，从而证明了大范围弱解的存在性。只是 Glimm 的证明对初始条件有很严格的限制。他假定，初值要近似地等于一个常数。从那时起，有不少人试图把 Glimm 构造解的方法变成一种实际可用的计算方法。后来，Chorin⁽⁴⁾ (1976) 将这种方法应用于带化学反应的流体力学问题（例如燃烧问题）的计算，取得了成功。特别是算出来的冲击波（间断）波面是陡的，只占一个网格，不象加人工粘性的方法，冲击波面要占好几个网格。现在一般称这种方法为 Glimm 方法或随机选取法（RCM）。

2. 二维问题

二维流体力学计算方法的研究开始于五十年代中期。到了六十年代，二维流体力学计算方法的研究进入了一个鼎盛时期，发表了大量的计算格式，并编制了许多程序/软件。在六十年代末期，Harlow⁽⁵⁾ (1969) 曾经编制了一个二维流体力学计算方法评述性的目录，列举了一百多篇文献和几十种程序的名称。二维流体力学计算之所以出现这种百花齐放的局面，主要是由于

二维流体力学运动的图象极其复杂,很难找到一种普适的格式能定量地(或至少定性地)计算出所有各种图象来。事实上,对于不同的模型,往往需要采用不同的格式进行计算。有时,甚至对同一个模型,在运动发展的不同阶段还要采用不同的格式,才能把整个运动过程计算出来。

由于一维流体力学计算中,作为拉氏方法的 von Neumann-Richtmyer 格式是十分有效的,所以在二维方法研究的初期也尝试用拉氏方法来解二维流体力学问题。五十年代中期,

Kolsky⁽⁶⁾(1955)构造的第一个二维格式就是跟踪质团的拉氏方法。此后, Goad⁽⁷⁾(1960), Schulz⁽⁸⁾(1964) Wilkins⁽⁹⁾(1964), Fritts, Boris⁽¹⁰⁾(1979) 等人都对拉氏方法作了进一步的研究,建立了一些格式,并编制了一些程序(例如 WAGER, TENSOR, HEMP, TOODY 等)。

二维拉氏方法离散化格式的建立基本上有两种方法。一是将方程(1.1)——(1.3)在随流体运动的网格(或在柱坐标情况下也有取成为网格的旋转体体积)上积分,然后写出这些积分的离散化近似表达式,从而得到差分格式, Kolsky 格式就是这样建立的。另一种是将方程(1.1)——(1.3)变换到拉氏坐标系中,再用差商去逼近微商。二维拉氏方法当然保持了一维拉氏方法的优点,但是由于二维流体运动中可能出现大变形现象,从而会造成拉氏网格的严重扭曲或翻转,导致计算不能进行下去。

克服拉氏网格相交的一个有效措施是 Browne⁽¹¹⁾(1966)提出来的重分网格的方法。这就是,每一步(对时间步长而言)

或经过若干步就将拉氏网格重新划分一次，把由于扭曲而显得畸形的网格，换成尽可能规整的新网格。新网格中的各力学量，是用旧网格上的相应量按照质量、动量、能量守恒原则重新计算得出的。当然，严格讲，这样的方法已经不再是跟踪质团的拉氏方法，而是一种下面将要提到的任意拉格朗日—欧拉方法了。

用积分方法建立的拉氏格式，网格可以是任意多边形的，一般采用四边形网格，但也有采三角形网格，例如Crowley⁽¹²⁾ (1970)的自由拉格朗日方法(FLAG方法)，Fritts Boris⁽¹⁰⁾的计算不可压缩流体力学的方法和我们的三角网格法⁽¹³⁾。三角形网格的一个突出优点是“可以防止网格翻转”，这是由于压力是随密度增加而单调增大，因此当三角形网格被压缩变形可能出现一个顶点将穿过其对边造成网格翻转的情况时，网格的体积已逐渐变小，从而密度逐渐变大，于是压力也变得很大，这就会把该顶点推开。这样固然避免了网格的翻转，体积不会为负保证计算进行下去，但是，会不会因此把本来应该扭曲的物理图象变得平缓了呢，这也是一个值得注意的问题。在三角网格法中密度、内能、压力离散化后的值取在网格中心，速度取在网格角点上。差分格式的建立是采用迴路积分的方法。对于动量方程，积分区域不是取在原网格上，而是取在由角点四周网格的重心和这些网格边界的中点之间的连线所围成的区域上。格式的建立考虑到了用二维程序去计算一维球对称问题时能保证计算结果的对称性。

在拉氏方法中，速度离散化以后的值往往取在网格的角点处这就意味着假定了在网格角点（包括位于接触间断面上的网格角