文章编号：1000-5773(2013)02-0216-07

不同炸药量在工事中爆炸的三维数值模拟*

任会兰，宁建国，许香照

（北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室，北京 100081）

摘要：基于消息传递接口(Message Passing Interface，MPI)模式，阐述了采用 Euler 方法的 PMMIC-3D 并行程序基本原理及并行设计策略，并对工事模型进行了数值模拟，数值模拟结果与实际现象及物理规律相符。工事内炸药爆炸产生的爆炸冲击波既有较高的超压峰值，又有较长的作用时间，遇到墙壁时会发生反射，产生反射高压，并会发生绕射汇聚，在墙后面一定区域内产生局部高压，与空中爆炸产生的爆炸冲击波相比，杀伤破坏作用更大。通过数值模拟能够清晰地看到爆炸冲击波的传播过程及其相互作用，可以确定爆炸冲击波到达各个位置处的时间。通过对比各个位置处的峰值超压，可以确定能有效毁伤一个确定工事的最佳药量。

关键词：消息传递接口；Euler 方法；爆炸与冲击；数值模拟

中图分类号：O383.2；O389 **文献标识码**：A

1 引 言

随着科学技术的发展，爆炸应用得越来越广泛，爆炸冲击波在各种不同环境中的传播规律成为人们研究的热点问题。而爆炸与冲击问题是一类涉及高应变率、高温、高压和相变等极端条件的瞬态动力学问题。在这些极端条件下，对爆炸与冲击问题的数值模拟变得十分困难，需要对材料的大变形、多种物质的界面以及各种强间断进行处理，比通常的流体力学问题、空气动力学问题及结构动力学问题要复杂得多[1]。爆炸问题属于高度非线性问题，目前研究爆炸问题常用的两种方法是模型实验和数值模拟。模型实验重复性差，技术难度大，而且成本非常高；数值模拟不仅成本较低而且更加便于观察，能突破实验和理论研究的局限性。而对三维爆炸与冲击问题进行数值模拟存在的最突出问题是，其计算规模大以及计算时间长，已经远远超出单机所能承受的能力范围。并行计算能够很好地解决上述问题，它对于大规模科学与工程计算越来越重要[2]。

数值模拟按坐标选取可以分为拉格朗日(Lagrange)方法和欧拉(Euler)方法，其中 Lagrange 方法网格随着物质一起运动变形，可以有效地跟踪材料物质界面，但是对于爆炸与冲击这类涉及大变形的问题，会因为网格严重畸变而导致数值求解无法进行下去。本研究针对三维爆炸与冲击问题的大变形、强间断、计算规模大、耗时长等特点，提出了 Euler 型数值方法的并行算法，很好地解决了上述问题。采用国际上流行的消息传递接口(Message Passing Interface，MPI)标准，设计了三维多物质弹塑性流体动力学并行程序(PMMIC-3D 程序)。MPI 是消息传递函数库的标准规范，基于分布式存储，但同样适应于共享存储，具有移植性好、功能强大、效率高等多种优点，是目前广泛使用的并行编程工具[3]。

本文简要介绍采用 Euler 方法的 PMMIC-3D 并行程序的基本原理以及设计策略，在此基础上对地

* **收稿日期**：2013-03-20

基金项目：国家重点基础研究发展计划(2010CB832706)；国家自然科学基金(11032002，11172045)

作者简介：任会兰(1973—)，女，博士，副教授，博士生导师，主要从事材料动态力学研究. E-mail：huilanren@bit.edu.cn

通讯作者：宁建国(1963—)，男，博士，教授，主要从事爆炸与毁伤技术、材料和结构动态力学研究.
E-mail：jgning@bit.edu.cn

下工事爆炸进行三维的全物理场数值模拟。炸药在地下工事中爆炸,受到地下封闭结构的影响,冲击波产生反射、绕射、叠加,其超压峰值远大于自由场中的压力,传播规律也不同于在自由大气中的传播。地下工事内炸药爆炸产生的爆炸冲击波既有较高的超压峰值,又有较长的作用时间,与空中爆炸产生的爆炸冲击波相比,杀伤破坏作用大很多[4]。将各个位置处的峰值超压与经验公式结果进行对比,验证PMMIC-3D并行程序的准确性;在同一位置处对不同炸药量爆炸进行数值模拟,能够清晰地看到爆炸冲击波的传播过程及其相互作用,以及到达各个位置的时间;分析不同炸药量爆炸在地下工事模型各个位置处的压力值,可以确定一个最佳炸药量以及最安全的位置,为以后的地下工事建筑设计以及如何破坏一个给定的工事提供一定的参考依据。

2　数学模型及数值方法

2.1　控制方程

为了能够较好地描述爆炸与冲击这一复杂物理过程, PMMIC-3D 并行程序采用不考虑外力、外源和热传导,非守恒形式的 Euler 流体弹塑性动力学偏微分方程组[5]。

质量守恒方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+u\cdot\nabla\rho+\rho\cdot\nabla u=0 \tag{1}$$

动量守恒方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+u\cdot\nabla u=\frac{1}{\rho}\cdot\nabla\sigma \tag{2}$$

能量守恒方程

$$\frac{\partial e}{\partial t}+u\cdot\nabla e=\frac{1}{\rho}\cdot\nabla(\sigma\cdot u) \tag{3}$$

式中:ρ 为密度,e 为比能量,u 为速度。

2.2　数值方法

将 3 个守恒方程按照各项的物理特性,统一写成如下形式[5]

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t}+u\cdot\nabla\varphi=H \tag{4}$$

式中:φ 代表 ρ(密度)、e(比能量)和 u(速度)等物理量; $u\cdot\nabla\varphi$ 是物理量 φ 在单位空间网格边界上的通量,即为对流项;H 为源项。

采用算子分裂算法,把总体方程组按空间 x、y、z 3 个方向进行分裂。对于每个方向,按物理效应把控制方程中的 3 组守恒方程分为两个阶段进行计算,即 Lagrange 阶段(压力效应步)和 Euler 阶段(输运步)。

第一阶段网格随流体运动,仅考虑源项的作用,即压力和偏应力的梯度效应作用,计算出质团的速度和比内能,并计算质团的动量和能量。加入人工黏性项(q)的动量和能量方程为

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{1}{\rho}\cdot\nabla[-(pI+q)+S] \tag{5}$$

$$\frac{\partial e}{\partial t}=\frac{1}{\rho}\cdot[-(pI+q)+S]:\dot{\varepsilon} \tag{6}$$

式中:p 表示体积应力,S 表示偏应力,$\dot{\varepsilon}$ 表示应变率。

对上述的连续方程进行离散的差分格式是:时间采用向前差分,空间采用一阶中心差分,从而得到 Lagrange 步的计算值$\tilde{u}^{n+1}$、$\tilde{e}^{n+1}$。在完成 Lagrange 步的计算后,网格比内能的增量为 $\Delta e_{ij}=\tilde{e}^{n+1}-e^{n}$。由于 Δe_{ij} 是网格量,当遇到混合网格时,需要将其分配给混合网格中的各种介质。程序将总内能增量按介质体积份额进行分配,得到 Lagrange 步后计算各介质的比内能值。

第二阶段考虑对流 $u\cdot\nabla\varphi$ 的影响,对质量、动量和能量在网格上进行重新分配,得到新的网格速度

以及网格内各介质的质量及内能。在 x 方向，设置网格标志 $\Omega_{i,j,k}$、$\Omega_{i+1,j,k}$，当 $u_{i+1/2,j,k}>0$ 时，$\Omega_{i,j,k}$ 为贡献网格，$\Omega_{i+1,j,k}$ 为接受网格；反之，$\Omega_{i+1,j,k}$ 为贡献网格，$\Omega_{i,j,k}$ 为接受网格。y、z 方向的情况与 x 方向类似。在 Euler 步中，贡献网格无论是纯网格还是混合网格，均采用一维输运算法，x、y、z 方向交替输运，以保证格式的精度及稳定性。以 x 方向为例，将贡献网格及接受网格分别记为 (id, j, k)、(ic, j, k)，输运速度由下式确定

$$u_{i+1/2,j,k}=\tilde{u}_{i+1/2,j,k}\Big/\left[1+\frac{\Delta t}{\Delta x_i}(\tilde{u}_{i+1/2,j,k}-u_{i,j,k})\right] \tag{7}$$

$$\tilde{u}_{i+1/2,j,k}=\frac{u_{i,j,k}\Delta x_{i+1}+u_{i+1,j,k}\Delta x_i}{\Delta x_{i+1}+\Delta x_i} \tag{8}$$

然后计算出 x 方向的总输运体积，$\Delta V=\Delta t\cdot A\cdot\tilde{u}_{i+1}$，其中 A 是相应 x 方向的输运面积，同理可以得出 y、z 方向的总输运体积。总输运体积确定后，按照体积份额方法进行介质输运，更新网格上的质量、动量和能量，得到新的网格物理量。

2.3 界面处理

PMMIC-3D 并行程序界面处理采用模糊界面方法，对于含有多种物质的混合网格，不区分物质间的界面；根据模糊方法计算体积比，把体积比作为模糊权重系数；根据输运质量和输运体积计算介质的密度；对网格进行分类，不同类网格之间视为物质界面；纯网格介质压力由状态方程计算，混合网格的压力由各状态方程计算之后，利用体积比进行加权平均；对介质进行模糊排序，决定输运优先权和模糊输运表；根据模糊权重计算输运量；按模糊输运表进行输运；在建模和计算中应用模糊方法，故称为“模糊界面方法”[6]。

在决定输运方案之前，根据模糊综合评判方法对介质输运优先权进行排序，基本原则是：主动介质优先于被动介质（所谓主动介质是指介质本身含有极高的能量或极高的运动速度，如爆炸场中的炸药和侵彻中的动能杆）；密度小者优先密度大者；气体优先于固体。对于具体情况应该根据具体的模糊专家系统规定排序规则。优先权的判断是一个模糊综合评判，其值“大”者优先，等权时平均输运。对于 N 种介质，按照模糊排序的基本原则排出各介质的输运优先权，然后制定输运规则表。只要介质种数是有限的，总是可以制定出相应的输运表。也就是说，利用模糊界面方法基本上能够解决多介质输运问题。

这种方法可能使得物质界面的描述显得略有粗糙，但是这一缺点可以通过增加网格数，缩小网格步长的方法来进行弥补。其特点是逻辑简单，便于计算，特别适合于处理三维、3 种以上介质的计算问题。

3 并行化实现方法

域分解是指把计算域分成若干非重叠或重叠的子区域，实现计算域沿着 3 个方向的任意分割，并创建子区域间的拓扑结构，一个处理器处理一个或多个子区域。PMMIC-3D 采用显式的差分格式以及把计算域分解成重叠的子区域的方法，如图 1 所示，将一个二维的计算域分解成 4 个子区域，其中灰色的重叠网格称为“子区域边界虚网格”。

为消除 PMMIC-3D 中 Euler 输运步的数据相关性，当前网格输运采用相邻网格更新前的值；同时为了消除因此而带来过量输运的问题，将原有在一个空间三重循环下完成的 3 个方向的输运改为在 3 个空间三重循环下完成，即每个空间三重循环只进行一个方向的输运，3 个方向的输运顺序随时间步交替变换。

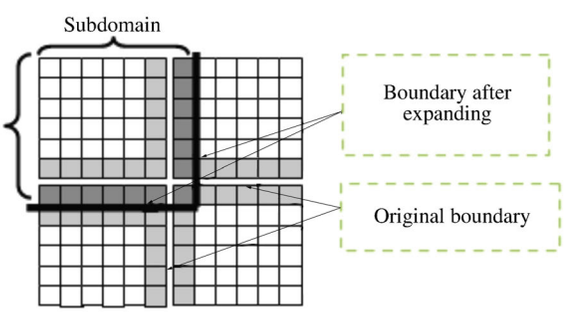


图 1 重叠子区域

Fig. 1 Subdomains and overlapping

PMMIC-3D 并行程序采用高维分解策略，在子区域 3 个方向通信中只有一个方向的通信为连续数据通信，其余两个方向为不连续数据块通信。程序

采用自定义新的数据类型来处理不连续数据块通信,其效率高,而且不占用额外的内存。为了避免程序因通信死锁,采用捆绑式发送和接收函数进行数据通信,同时为了避免重复通信及子区域间对角通信,采用图 2 的方式进行 3 个方向的通信。

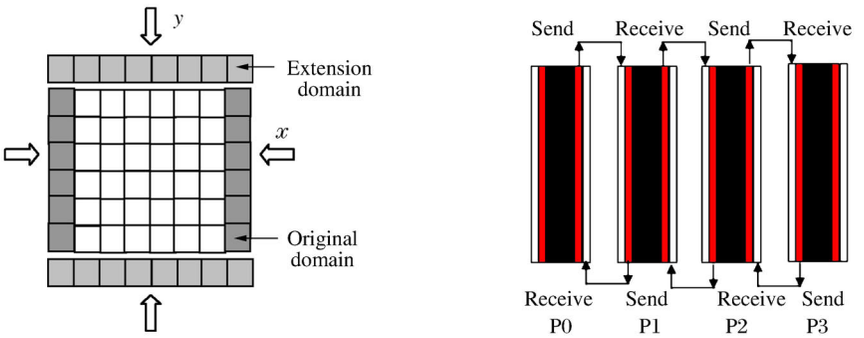


图 2　计算域分区的网格图及数据通信示意图

Fig. 2　The grid graph of computational domain partition and the schematic diagram of data communication

4　工事中爆炸数值模拟分析

4.1　计算模型

算例模型如图 3 所示,是一密闭环境,上、下均对其进行密封处理,采用球形装药,炸药位于模型的正中心,采用不同的药量进行计算。周围的墙体作为刚性壁处理,其余采用连续边界条件。之所以采用刚性壁处理,主要是为了简化计算,可以清晰看到爆炸冲击波在模型内的传播过程及其相互作用。装药模型如表 1 所示,计算域为 25.0 m×26.0 m ×5.0 m,采用等步长离散计算域,网格步长为 0.04 m,离散 625×651×126 个网格,共 51 266 250 个网格。

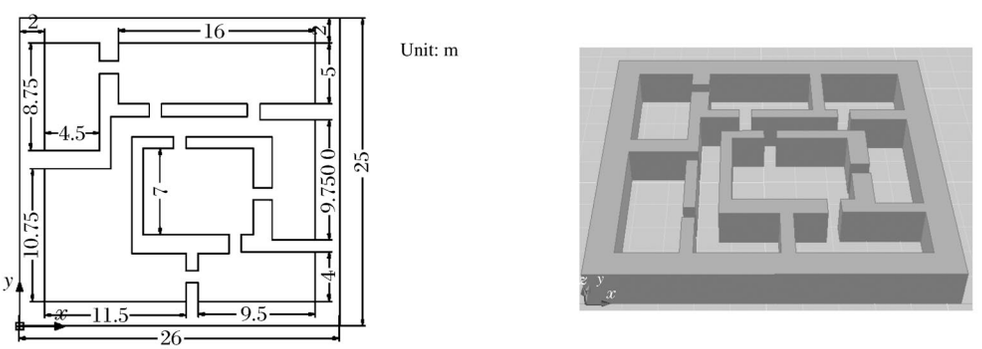


图 3　二维尺寸图以及没有密封的三维图

Fig. 3　Two-dimensional size and unsealed three-dimensional graph

表 1　TNT 装药模型

Table 1　The model of TNT charge

Case	Charge quantity /(kg)	Charge radius /(m)	Space grid step /(m×m×m)	Computational domain /(m×m×m)
1	100	0.244	0.04×0.04×0.04	25.0×26.0 ×5.0
2	200	0.306	0.04×0.04×0.04	25.0×26.0 ×5.0
3	400	0.386	0.04×0.04×0.04	25.0×26.0 ×5.0
4	500	0.416	0.04×0.04×0.04	25.0×26.0 ×5.0
5	800	0.486	0.04×0.04×0.04	25.0×26.0 ×5.0
6	1 000	0.525	0.04×0.04×0.04	25.0×26.0 ×5.0

炸药爆轰产物的状态方程在程序里选用可变指数多方气体状态方程，空气采用理想气体的状态方程。爆轰产物主要参数见表 2 和表 3，其中 ρ_0 为初始炸药密度，p_{CJ} 为 CJ 爆轰时产生的压力，C 为 CJ 爆轰时的冲击波速度，e_0 为炸药的初始比内能，k_0 为爆轰产物的多方指数，k_1 是爆轰产物充分膨胀下的多方指数，b 是调节系数。

表 2 TNT 炸药爆炸性能参数

Table 2 The performance parameter of TNT explosive detonation

ρ_0/(g/cm^3)	p_{CJ}/(GPa)	C/(m/s)	e_0/(kJ/g)
1.60	18.5	6 970	7.0

表 3 TNT 炸药可变指数多方气体状态方程参数

Table 3 The parameter of equation of state for TNT explosive

k_0	k_1	b
3.0	3.16	1.0

4.2 数值模拟结果分析

图 4 显示了爆炸冲击波在整个模型内部的传播过程及其相互作用情况，其结果与实际的物理规律是相吻合的。由图 4 可以发现，在整个爆炸冲击波传播过程中，当爆炸冲击波遇到墙壁时首先发生反

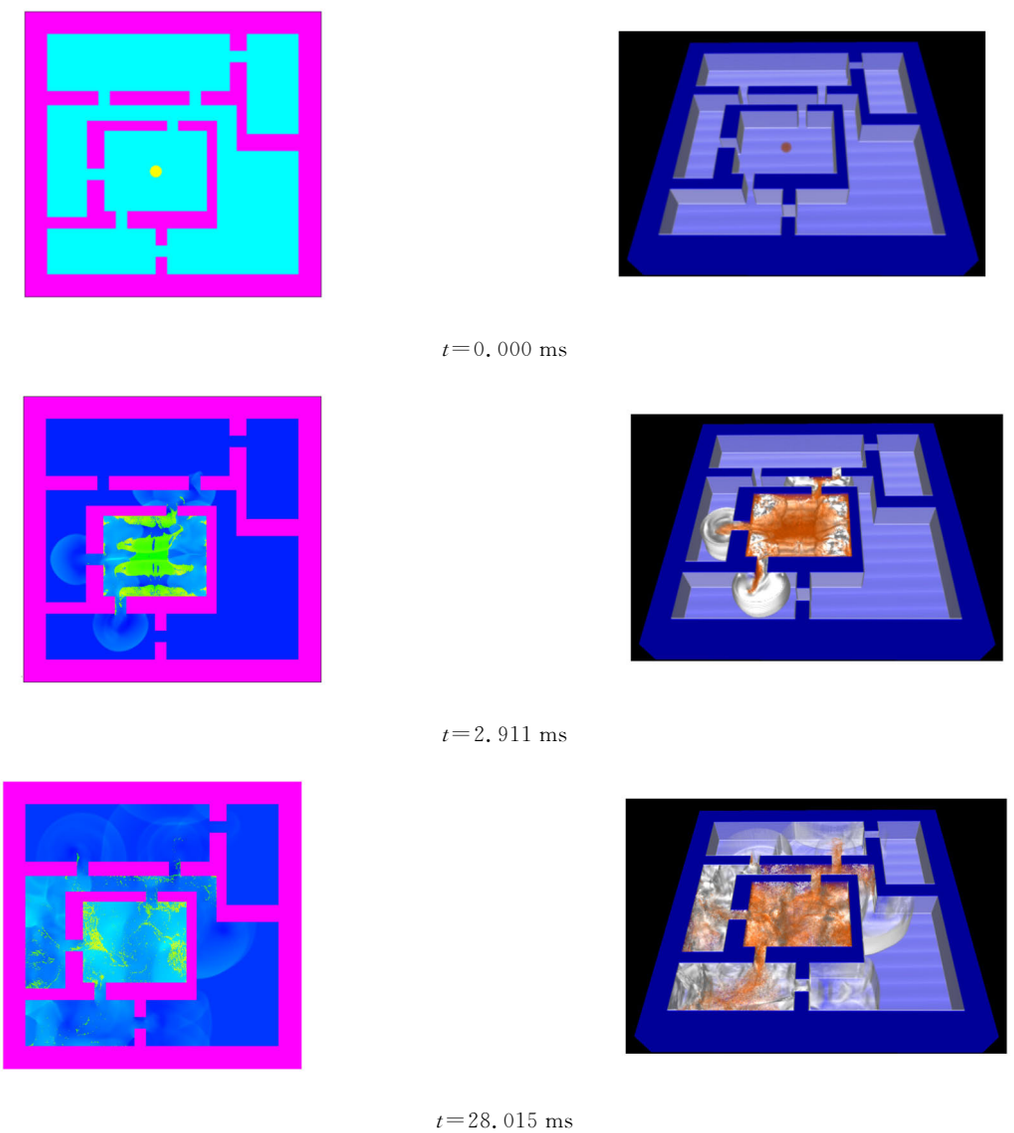


图 4 二维以及对应的三维数值模拟结果

Fig. 4 Two-dimensional and corresponding three-dimensional numerical simulation results

射,产生反射高压,而后再绕射到墙壁的后方并开始汇聚,延长了爆炸冲击波到达墙后的时间,由于墙壁吸收一部分冲击波能量,相对于没有墙壁的情况,冲击波的能量将明显减小。爆炸冲击波在 3 个方向的绕射汇聚作用下,将在墙壁后面一定区域内产生局部高压,这个区域随着爆炸冲击波的传播不断扩大,最后再次形成球面波传播。墙壁后的最大冲击波压力峰值出现在距离墙壁背面还有一段距离的位置处,而不是出现在紧靠墙壁背面的位置。

由数值模拟结果监测爆炸冲击波到达如图 5 所示的 7 个位置处的时间,从图 6 可以看到不同炸药量(w)的爆炸冲击波达到 7 个位置处的时间 t_d。由图 6 可以看出,随着炸药量的增加,爆炸冲击波到达同一位置处的时间并不是成线性下降,而是随着炸药量的减少,到达时间的减少量变平缓。由不同药量到达 7 个位置处的时间可知,当炸药量小于 400 kg 时,随着炸药量的增加,到达同一位置处的时间明显减少;当炸药量大于 400 kg 时,随着炸药量的增加,到达同一位置处的时间几乎不变。这主要是受制于模型,当炸药量超过某一个值时,由于模型内部墙壁对爆炸冲击波的反射作用,使得爆炸冲击波在模型内的传播速度相差不大,进而导致到达各个位置处的时间几乎一致。

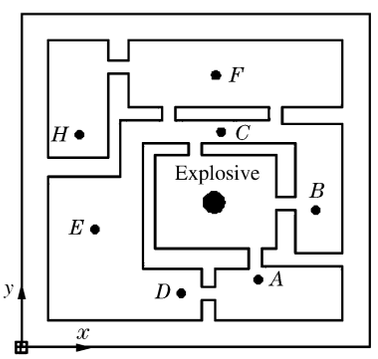


图 5　关键点分布图

Fig. 5　The distribution of the critical points

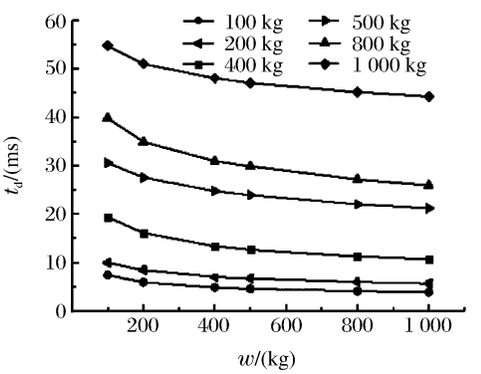


图 6　不同炸药量下冲击波到达关键点的时间

Fig. 6　The time of shock wave to reach the critical point under different amounts of explosive

由图 4 的二维切片以及三维数值模拟结果,可以看出冲击波在模型内的传播过程及其相互作用。将不同药量的数值模拟结果绘制于图中,由图 7 和图 8 可以看出不同药量在关键点处的压力峰值。对比不同位置处关键点压力的大小可以发现,随着药量的减小,各个关键点处的压力也减小。若以一个大气压超压为毁伤标准,由数值模拟结果可以发现,当炸药量为 400 kg 时最为合适,模型中各个位置处的压力基本超过了一个超压。

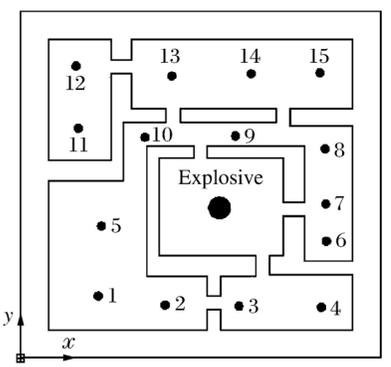


图 7　关键点分布图

Fig. 7　The distribution of the critical points

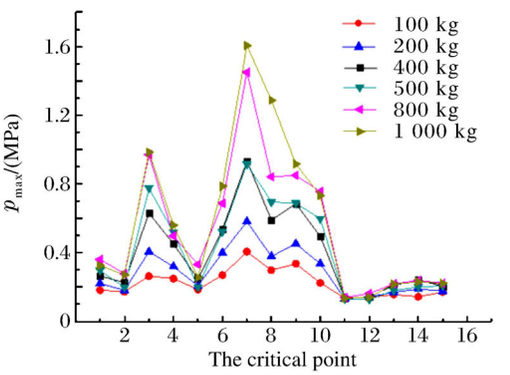


图 8　关键点处的峰值压力

Fig. 8　The peak pressures of the critical point

5 结 论

(1) 本文阐述了 PMMIC-3D 并行程序的基本原理及并行设计策略,并对算例模型进行了数值模拟,数值模拟结果与实际的物理规律相符,表明所采用的并行算法是合理的,程序是可行的。

(2) 爆炸冲击波遇到墙壁时会发生反射,产生反射高压,并会发生绕射汇聚,在墙后面一定区域内产生局部高压,这个区域随着冲击波的传播不断扩大,最后再次形成球面波传播。其中最大的冲击波峰值超压出现在距离墙壁一段位置处,而并不是紧贴墙壁产生。

(3) 随着炸药量的增加,爆炸冲击波到达同一位置处的时间并不是线性下降,而是随着炸药量的减少,到达同一位置处的时间曲线变平缓。对于一个给定的模型,存在一个最佳药量,大于这个药量时,随着药量的增加,到达同一位置处的时间缓慢减小;小于这个值时,随着炸药量的增加,到达同一位置处的时间迅速减小。

(4) 对于一个给定的工事模型,由 PMMIC-3D 并行程序对其进行数值模拟分析,由不同位置处峰值超压的大小可以判定固定位置处能够对工事模型进行有效毁伤的最佳药量。对今后进一步的研究工作具有一定的参考作用。

References:

[1] Ning J G, Wang C, Ma T B. Explosion and Shock Dynamics [M]. Beijing: National Defence Industry Press, 2010. (in Chinese)
宁建国,王 成,马天宝. 爆炸与冲击动力学 [M]. 北京:国防工业出版社,2010.

[2] Dongarra J, Foster I, Fox G, et al. Sourcebook of Parallel Computing [M]. Translated by Mo Z Y, Chen J, Cao X L. Beijing: Publishing House of Electronics Industry, 2005. (in Chinese)
Dongarra J, Foster I, Fox G, 等. 并行计算综论 [M]. 莫则尧,陈 军,曹小林,译. 北京:电子工业出版社,2005.

[3] Malard J. MPI: A message-passing interface standard [R]. UK: The University of Edinburgh, 1994.

[4] Gao J C. Dynamic caustics analysis of crack in samdwich materials under blasting stress wave [D]. Xuzhou: China University of Mining and Technology, 1987. (in Chinese)
高金臣. 爆破荷载在岩体中引起应力波的传播理论与实验研究 [D]. 徐州:中国矿业大学,1987.

[5] Fei G L, Ma T B, Hao L. Large-scale high performance computation on 3D explosion and shock problems [J]. Appl Math Mech (Eng Ed), 2011, 32(3): 375-382.

[6] Ning J G, Chen L W. Fuzzy interface treatment in Eulerian method [J]. Sci China Ser E, 2004, 47(5): 550-568.

The 3-D Numerical Simulation for Different Explosive Charges in the Fortifications

REN Hui-Lan, NING Jian-Guo, XU Xiang-Zhao

(*State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing* 100081, *China*)

Abstract: The basic principle and the parallel design strategy of the PMMIC-3D parallel program which using Euler method based on the message passing interface (MPI) mode were stated. After numerically stimulating the fortification mode, it can be seen that the results of numerical stimulation basically match with the reality and the physical laws. The shock waves of explosive detonation in fortifications not only had a higher peak overpressure, but also had a longer duration of action. When the shock wave met the wall, it would reflect and produce the reflected high pressure. Because of the diffraction convergence, the local high pressure would be brought about in a certain region behind the wall, in which the destructive effect was much larger compared with the shock waves of air explosion. The propagation process and the interaction of shock waves can be seen clearly by the numerical stimulation, which can determine the arrival time of the shock waves at various positions. The optimal explosive charge can be ensured by comparing the overpressure value of shock waves at different places.

Key words: message passing interface (MPI); Euler method; explosion and shock; numerical simulation