

爆轰波在炸药-金属界面上的折射分析

于明 孙宇涛 刘全

Analysis on refraction of detonation wave at the explosive-metal interface

Yu Ming Sun Yu-Tao Liu Quan

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 114702 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.114702

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.114702>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I11>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

混合物状态方程的计算

Calculation of equation of state of a material mixture

物理学报.2015, 64(6): 064702 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.064702>

炸药爆轰的连续介质本构模型和数值计算方法

A continuum constitutive model and computational method of explosive detonation

物理学报.2014, 63(22): 224702 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.224702>

来流边界层效应下斜坡诱导的斜爆轰波

Ramp-induced oblique detonation wave with an incoming boundary layer effect

物理学报.2014, 63(20): 204701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.204701>

基于微流控光学可调谐的渐变折射率特性研究

Analysis of the tunable liquid gradient index based on optofluidics

物理学报.2014, 63(15): 154701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.154701>

基于硅柱-磁性液体体系的光子晶体的可调谐负折射特性研究

Tunable negative refraction properties of photonic crystals based on silicon columns arranged in magnetic liquids

物理学报.2012, 61(19): 194703 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.194703>

# 爆轰波在炸药-金属界面上的折射分析\*

于明 孙宇涛 刘全†

(北京应用物理与计算数学研究所, 计算物理重点实验室, 北京 100094)

(2014年9月11日收到; 2014年11月30日收到修改稿)

针对爆轰波在炸药-金属界面上折射时由实验获得的金属折射冲击波压力与经典爆轰波极曲线理论预测的压力存在显著差异这一问题, 本文展开了进一步的理论和数值模拟分析研究. 首先通过分析指出经典爆轰波极曲线理论的缺陷, 并对爆轰波极曲线理论进行了改进, 改进爆轰波极曲线理论给出了炸药爆轰波折射类型以及折射冲击作用点处的压力值. 然后发展了一个基于次特征理论来数值求解爆轰反应流动控制方程的二阶中心型 Lagrange 方法, 并数值模拟了一个典型的炸药爆轰波折射实验. 改进爆轰波极曲线理论和数值模拟分析结果表明, 爆轰波折射类型有三种: 反射冲击波的正规折射、带 Mach 反射的非正规折射、无反射波的正规折射, 并且金属折射冲击波压力值随入射角增大而单调减小.

**关键词:** 爆轰波, 折射, 极曲线理论, ZND 模型

**PACS:** 47.4Rs, 40.40.Nm, 47.70.Fw, 82.4Fp

**DOI:** 10.7498/aps.64.114702

## 1 引言

高能炸药 (high explosive, HE) 的爆轰与金属材料相互作用, 在国防应用与民用经济中具有重要作用, 也是爆轰物理、高压物理、流体物理等学科领域的重要研究内容. 爆轰与金属材料的相互作用, 首先表现为爆轰波在炸药-金属界面上的折射冲击作用. 因此, 分析爆轰波在炸药-金属界面上的折射, 不但对于揭示爆轰物理规律具有理论价值, 而且对于爆轰工程应用具有实用意义.

对爆轰波在炸药-金属界面上的折射问题, 最早使用经典爆轰波极曲线理论进行研究. Sternberg 等<sup>[1]</sup>分析了爆轰波对铁的折射现象, 在考虑到铁在 13 GPa 压力下会发生  $\alpha$  相到  $\epsilon$  相的相变条件下预告了第一和第二折射冲击波参数. 王继海<sup>[2]</sup>较系统地分析了 Comp. B 炸药的爆轰波对钨、钢、铝、铝-镁合金等金属的折射现象, 预告了金属折射冲击波压力与爆轰波入射角之间的关系. 经典爆轰波极曲线理论给出的主要结论是: 1) 随入射角增大, 爆轰波折射类型依次出现: 反射冲击波的正规

折射、带 Mach 反射的非正规折射、反射冲击波的正规折射、反射稀疏波的正规折射; 2) 出现非正规折射时, 金属折射冲击波压力突然增大.

后来, 实验测试技术被用来研究炸药爆轰波折射现象. 典型的实验有如下三个: 1) 法国原子能委员会的 Cheret<sup>[3]</sup>考察了 TATB 基的 T2 炸药的爆轰波对铜的折射; 2) 美国 Los Alamos 国家实验室的 Walsh<sup>[4]</sup>考察了 Comp. B 炸药和 PBX9501 炸药的爆轰波对铜和铀的折射; 3) 法国原子能委员会的 Aveille<sup>[5]</sup>考察了 T2 炸药和 HMX 基的 X1 炸药的爆轰波对铜的折射. 所有这些实验获得的金属折射冲击波压力与经典爆轰波极曲线理论预测的折射冲击波压力均存在两方面的显著差异: 1) 变化趋势的差异: 经典爆轰波极曲线理论预测在出现非正规折射时金属折射冲击波压力值突然增大, 而实验获得的金属折射冲击波压力值随入射角增大而单调减小; 2) 数值的差异: 实验获得的金属折射冲击波压力值与经典爆轰波极曲线理论预测的压力值相比较, 在反射冲击波的正规折射阶段高达 5%, 在非正规折射阶段低达 15%, 在反射稀疏波的正规折射阶

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11272064) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: liuquan@iapcm.ac.cn

段高达30%。Aveille<sup>[5]</sup>给出的实验和理论结果差异见图1所示。

这些显著差异引起了广大爆轰科学工作者的极大关注,一直以来力图通过各种手段对这一问题给予合理的解释。

本文通过分析炸药爆轰波的折射过程,指出经典爆轰波极曲线理论建立在爆轰CJ模型上,将爆轰波视为一个无厚度的间断面,而未考虑爆轰前导冲击波及其跟随的化学反应区,正是这一简化处理导致实验结果与理论结果出现显著差异.由此改进爆轰波极曲线理论,将极曲线理论建立在爆轰ZND模型上,考虑了爆轰前导冲击波及其跟随的化学反应区的影响.改进爆轰波极曲线理论给出了炸药爆轰波折射类型以及折射冲击作用点处的压力值,与经典爆轰波极曲线理论给出的结果存在不一致之处.同时,为了更加准确地了解爆轰化学反应流场情况以及爆轰波折射冲击情况,需要高精度、高分辨率的计算方法来数值模拟爆轰波对金属的作用过程.由此发展了一个基于次特征理论的二阶中心型Lagrange方法来数值求解带Ignition-Growth化学反应率的爆轰反应流动控制方程,并对一个典型的炸药爆轰波折射实验进行了数值模拟,数值计算结果与改进爆轰波极曲线理论给出的爆轰波折射类型以及折射冲击作用点处的压力值一致,并与实验获得的金属折射冲击波压力值符合良好。

## 2 爆轰波折射的理论分析

爆轰波极曲线理论分析爆轰波在炸药-金属界面上的折射冲击作用时,将坐标放置在爆轰波与界面的交点上,这样将爆轰波折射冲击作用过程定常化.根据采用的不同爆轰理论模型,爆轰波极曲线与金属冲击波极曲线有不同的相交方式,从而可以确定不同的爆轰波折射类型与折射冲击波压力值.需要指出的是,爆轰波极曲线理论给出的物理量是折射冲击作用点处的值。

### 2.1 经典爆轰波极曲线理论

经典爆轰波极曲线理论采用十分简单的爆轰CJ模型,爆轰波被视为一个无厚度的间断面,爆轰前导冲击波及其跟随的化学反应区均不予考虑.这样,经典爆轰波极曲线理论描述的爆轰波折射的主要特点为: 1) 以CJ压力值对金属进行冲击作用; 2) 爆轰波极曲线由爆轰气体产物状态方程决定; 3) 爆

轰波后流动相对爆轰波为超声速流动状态; 4) 爆轰波后流场通常视为常物理量区域; 5) 爆轰反射波极曲线起始点状态为 $(p_{CJ}, \theta_{CJ})$ .

在爆轰气体产物采用Jones-Wilkins-Lee (JWL)形式状态方程条件下,爆轰冲击波极曲线关系式可以写成如下表达式:

$$p = \frac{2\rho_0[b(1)a(\bar{v}) - b(\bar{v})a(1)]}{2\rho_0b(1) - (1 - \bar{v})b(1)b(\bar{v})},$$

$$\text{tg } \theta = \frac{\sqrt{\rho_0 D_{CJ}^2 p(1 - \bar{v}) - p^2}}{\rho_0 D_{CJ}^2 - p}, \quad (1)$$

式中,  $\bar{v} = \frac{v}{v_0}$ ,

$$a(\bar{v}) = A \left( 1 - \frac{\omega}{R_1 \bar{v}} \right) \exp(-R_1 \bar{v})$$

$$+ B \left( 1 - \frac{\omega}{R_2 \bar{v}} \right) \exp(-R_2 \bar{v}),$$

$b(\bar{v}) = \frac{\omega \rho_0}{\bar{v}}$ ,  $\rho_0 = \frac{1}{v_0}$  和  $D_{CJ}$  是炸药初始密度和CJ爆速;  $A, B, R_1, R_2, \omega$  是与炸药爆轰产物相关的常数。

在采用JWL形式状态方程下,爆轰气体产物稀疏波的关系式为

$$\frac{dp}{d\bar{v}} = \frac{da(\bar{v})}{d\bar{v}} + \frac{p - a(\bar{v})}{b(\bar{v})} \frac{db(\bar{v})}{d\bar{v}} - v_0 p b(\bar{v})$$

$$= -\frac{c^2}{v_0 \bar{v}^2},$$

$$\frac{dq^2}{d\bar{v}} = \pm \frac{2c^2}{\bar{v}},$$

$$\frac{d\theta}{d\bar{v}} = \mp \frac{\sqrt{c^2(q^2 - c^2)}}{\bar{v}q^2}, \quad (2)$$

式中,  $q$  是局部坐标下流动速度,  $c$  是爆轰流场声速。

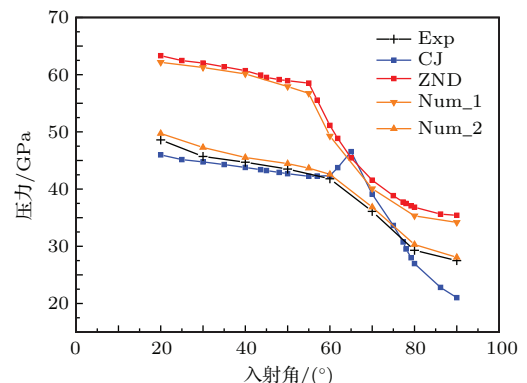


图1 Aveille实验爆轰波对铜折射时折射冲击波压力变化  
Fig. 1. Pressure values under different incident angles for Aveille's detonation experiment.

从图1可以看出,经典爆轰波极曲线理论结果(标注CJ的值)与Aveille<sup>[5]</sup>的实验结果(标注Exp

的值)在压力变化趋势与压力数值这两方面的差异均十分显著.正是采用爆轰CJ模型这一简化处理,导致实验结果与理论结果出现显著差异,因此有必要对爆轰波极曲线理论进行改进,采用更加合理的ZND模型来描述炸药爆轰过程.

### 2.2 改进爆轰波极曲线理论

当考虑到炸药爆轰具有一定的空间结构时,采用爆轰ZND模型是更合理的,爆轰波被视为具有一定厚度的间断面,未反应炸药经前导冲击波压缩后压力值变成Von Neumann(VN)尖峰值,紧跟着进行剧烈的化学反应.爆轰ZND模型确定的平面一维流动特点是:相对前导冲击波为超声速的来流,通过前导冲击波以后变成亚声速状态,经化学反应膨胀在声速线处变成声速状态(CJ状态),然后经过Taylor稀疏波继续膨胀变成超超声速状态.当爆轰波在炸药-金属界面折射时,首先是爆轰前导冲击波在金属介质中进行折射冲击作用,因此分析爆轰波折射时必须围绕爆轰前导冲击波开展.这样,与经典爆轰波极曲线理论相对应,改进爆轰波极曲线理论描述的爆轰波折射的主要特点为:1)以VN尖峰压力值对金属进行冲击作用;2)爆轰波极曲线由固体未反应炸药状态方程决定;3)不同爆轰入射角时,爆轰前导冲击波后流动相对爆轰波可能出现亚声速、声速、超超声速等多种流动状态;4)爆轰前导冲击波后流场不再视为常物理量区域;5)由于爆轰前导冲击波后流动相对爆轰波可能出现亚声速状态,因此爆轰前导冲击波可能出现没有反射波的情况;在爆轰前导冲击波后流动相对爆轰波为超超声速状态而能够出现反射波的情况下,反射波极曲线起始点状态为 $(p_{VN}, \theta_{VN})$ .

固体未反应炸药采用JWL形式状态方程条件下,爆轰波极曲线关系式和稀疏波关系式同(1),(2)式,但式中 $A, B, R_1, R_2, \omega$ 为与固体炸药相关的常数.

改进爆轰波极曲线理论给出T2炸药爆轰波对铜折射时铜介质折射冲击波压力变化情况,也显示在图1中(标注ZND的值),与Aveille<sup>[5]</sup>的实验结果相比较,两者变化趋势一致,但理论值偏高.

下面分析改进爆轰波极曲线理论值偏高的原因.在爆轰ZND模型下,爆轰波折射的一个典型流动图像如图2所示,OI为入射的爆轰前导冲击波,OT为折射冲击波,OR为反射波,OS为炸药-金属界面,ac为爆轰声速线,bc为爆轰化学反应终止线,

其中点a和b为声速线和化学反应终止线与界面的交点,点t为声速线与折射冲击波的交点.爆轰化学反应膨胀和爆轰Taylor稀疏波会穿过界面OS进入金属与折射冲击波OT相互作用,从而引起金属折射冲击波强度沿冲击波长度方向 $O \rightarrow A$ 上的衰减,这样,金属折射冲击作用点O处与金属自由表面A处的压力会不同.并且,由于CJ状态之前的化学反应膨胀过程十分剧烈,引起的金属折射冲击波衰减会十分陡峭,所以折射冲击波OT上的Ot段会以极大压力梯度进行衰减;而Taylor稀疏波膨胀过程较缓慢,引起的金属折射冲击波衰减会较平缓,所以折射冲击波OT上的tA段会以较小压力梯度进行衰减.改进爆轰波极曲线理论给出的是金属折射冲击作用点O处的压力值,而实验给出的是金属自由表面A处的压力值,显然,理论值高于实验值是合理的.

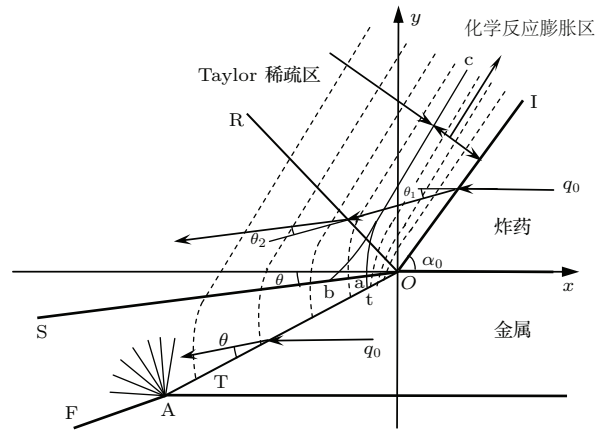


图2 ZND爆轰波一种典型折射流场示意图  
Fig. 2. A refraction flowfield under ZND detonation wave.

经典爆轰波极曲线理论和改进爆轰波极曲线理论给出的折射类型存在不一致之处,结果见图3所示.图中,黑线为金属折射冲击波极曲线,红线为经典经典爆轰波极曲线,蓝线为改进爆轰波极曲线,线I表示入射冲击波,线R表示反射波,CJ表示CJ点,VN表示Von Neumann尖峰点,Ce表示未反应炸药声速点,CS表示爆轰产物声速点.对经典爆轰波极曲线理论, $0^\circ \leq \alpha_0 \leq 61.8^\circ$ 时,出现反射冲击波的正规折射; $61.8^\circ < \alpha_0 \leq 77.3^\circ$ 时,出现带Mach反射的非正规折射; $77.3^\circ < \alpha_0 \leq 79.2^\circ$ 时,再次出现反射冲击波的正规折射; $79.2^\circ < \alpha_0 \leq 90.0^\circ$ 时,出现反射稀疏波的正规折射.对改进爆轰波极曲线理论, $0^\circ \leq \alpha_0 \leq 55.0^\circ$ 时,出现反射冲击波的正规折射;



55.0° < α<sub>0</sub> ≤ 86.2° 时, 出现带 Mach 反射的非正规折射; 86.2° < α<sub>0</sub> ≤ 90.0° 时, 出现无反射波的正正规折射. 特别地, 无反射波的正正规折射是经典爆轰

波极曲线理论不能给出的折射类型, 因为经典爆轰极曲线理论不存在入射波后流动是亚声速的条件.

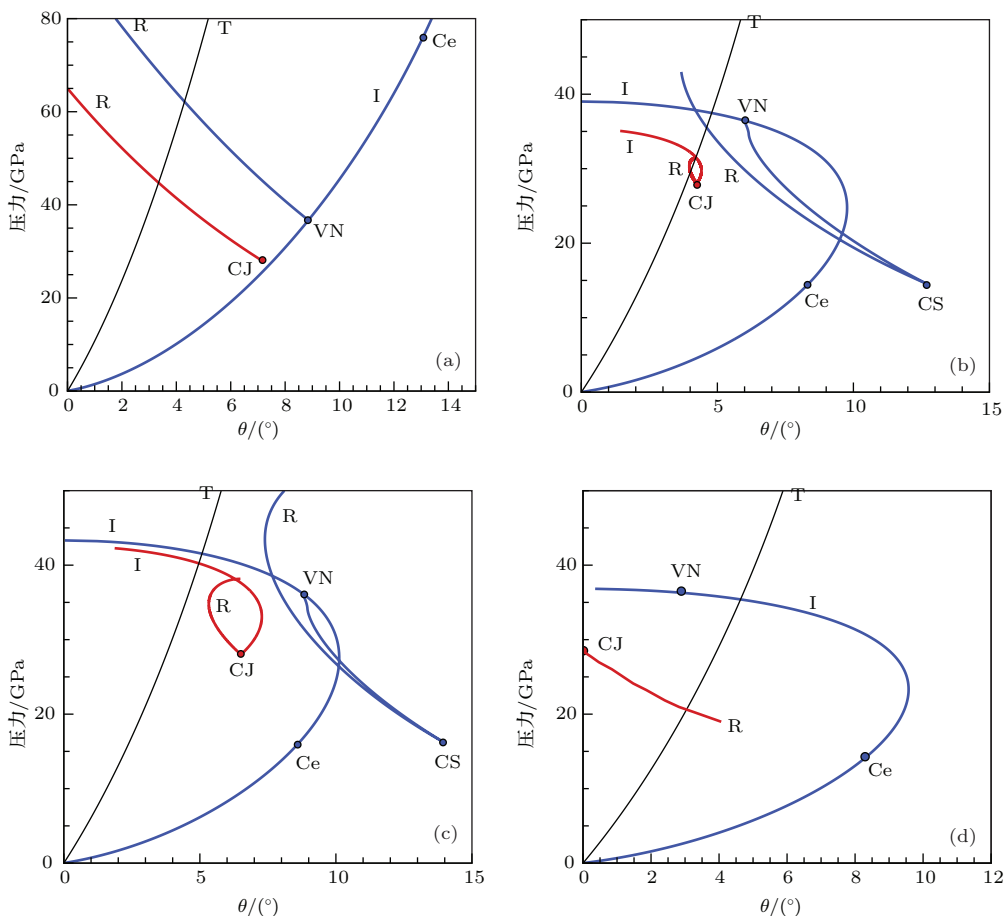


图3 爆轰波折射类型 (a) α<sub>0</sub> = 30°; (b) α<sub>0</sub> = 70°; (c) α<sub>0</sub> = 78°; (d) α<sub>0</sub> = 90°

Fig. 3. Refraction styles about detonation wave: (a) α<sub>0</sub> = 30°; (b) α<sub>0</sub> = 70°; (c) α<sub>0</sub> = 78°; (d) α<sub>0</sub> = 90°.

为了验证改进爆轰波极曲线理论给出的折射类型, 同时给出金属折射冲击全流场压力情况, 采用数值模拟方法考察爆轰波折射冲击过程是必要的.

### 3 爆轰反应流动的数值模拟方法

#### 3.1 爆轰反应流动控制方程

对爆轰波折射这种多物质流动过程, 本文运用 Lagrange 数值方法来求解.

目前工程应用最广泛的 Lagrange 流体力学方法, 存在如下主要问题: 1) 通常采用交错网格离散 (即密度、压力、内能等量定义在网格中心, 而速度定义在网格节点) 方式, 难以保持总能量守恒; 2) 时间和空间方向均仅为一阶精度, 且难以推广到高阶精度; 3) 利用人为黏性捕捉爆轰波时爆轰波往往

被抹平, 爆轰间断的分辨率低, 并且人为黏性系数需靠经验确定.

爆轰波在炸药-金属界面上的折射过程, 存在冲击波、稀疏波、化学反应等复杂流动及其相互作用现象, 采用具有高精度、高分辨率性质的中心型离散 (即将密度、压力、内能、速度等所有物理量均定义在网格中心) 方式求解是必要的.

在 Lagrange 系统下, 二维爆轰反应流动控制方程可写成如下积分型表达式:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \mathbf{u} dS + \int_{\partial\Omega} \mathbf{H} \cdot \mathbf{n} dl = \mathbf{r}, \quad (3)$$

其中,  $\mathbf{u} = [-1, \rho u, \rho v, \rho E, \rho \lambda]^T$ ,  $\rho$  为密度,  $u, v$  为速度,  $\lambda$  为化学反应质量组分,  $p$  为压力,  $E$  为总能量;  $\mathbf{H} = \mathbf{F}i + \mathbf{G}j$  为张量通量, 其中  $\mathbf{F} = (u, p, 0, \rho u, 0)^T$ ,  $\mathbf{G} = (v, 0, p, \rho v, 0)^T$ ;  $\mathbf{r} = [0, 0, 0, 0, \rho r]^T$ ,  $r$  为化学反应率;  $\Omega(t)$  为控制体

积,  $\partial\Omega(t)$  为控制体边界,  $\mathbf{n} = n_x\mathbf{i} + n_y\mathbf{j}$  为控制体单位外法向矢量,  $dl$  为控制体边界的微分长度; 控制体面积为

$$A_\Omega = \int_\Omega dS.$$

在爆轰 ZND 模型下, 化学反应率采用三项式 Ignition-Growth 模型 [6], 即

$$\begin{aligned} r &= I(\eta - 1 - a)^n(1 - \lambda)^y H(\lambda_I - \lambda) \\ &+ G_1(1 - \lambda)^{y_1} \lambda^{x_1} P^{z_1} H(\lambda_{G_1} - \lambda) \\ &+ G_2(1 - \lambda)^{y_2} \lambda^{x_2} P^{z_2} H(\lambda - \lambda_{G_2}). \end{aligned}$$

在化学反应混合区通常采用等温等压假设 [7], 物质状态方程可以表达成

$$\begin{aligned} V &= (1 - \lambda)V_s + \lambda V_g, \\ e &= (1 - \lambda)e_s + \lambda e_g - \lambda q, \\ p &= A_s \exp(-R_{1s}V_s) + B_s \exp(-R_{2s}V_s) \\ &+ \frac{\omega_s C_{V_s}}{V_s} T, \\ p &= A_g \exp(-R_{1g}V_g) + B_g \exp(-R_{2g}V_g) \\ &+ \frac{\omega_g C_{V_g}}{V_g} T, \\ e_s &= \frac{A_s}{\rho_0 R_{1s}} \exp(-R_{1s}V_s) + \frac{B_s}{\rho_0 R_{2s}} \exp(-R_{2s}V_s) \\ &+ \frac{C_{V_s}}{\rho_0} T, \\ e_g &= \frac{A_g}{\rho_0 R_{1g}} \exp(-R_{1g}V_g) + \frac{B_g}{\rho_0 R_{2g}} \exp(-R_{2g}V_g) \\ &+ \frac{C_{V_g}}{\rho_0} T, \end{aligned}$$

式中  $V = \rho_0/\rho$  为相对体积,  $e$  为内能,  $q$  为化学反应释放的单位质量热量,  $T$  为温度, 下标 s 表示固相、g 表示气相.

在 Lagrange 系统下, 控制体与流体的运动速度相同, 并且控制体内的质量守恒. 记控制体  $\Omega$  内流体质量为  $m_\Omega$ , 并定义控制体中心处的任一物理量  $f$  的质量平均值为

$$\bar{f}_\Omega = \frac{1}{m_\Omega} \int_\Omega \rho f dS.$$

这样, (3) 式可写为便于空间离散的如下积分形式:

$$\frac{d}{dt} \bar{\mathbf{u}}_\Omega + \frac{1}{m_\Omega} \int_{\partial\Omega} \mathbf{H} \cdot \mathbf{n} dl = \bar{\mathbf{r}}_\Omega, \quad (4)$$

其中,

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{u}}_\Omega &= (-\tau_\Omega, u_\Omega, v_\Omega, E_\Omega, \lambda_\Omega)^\top, \\ \bar{\mathbf{r}}_\Omega &= (0, 0, 0, 0, r_\Omega)^\top, \quad \tau_\Omega = A_\Omega/m_\Omega. \end{aligned}$$

### 3.2 数值计算格式 [8]

对任意四边形控制体, 空间方向的离散采用有限体积格式可表述为

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \bar{\mathbf{u}}_\Omega &= -\frac{1}{m_\Omega} \sum_{k=1}^4 \int_{I_k} \mathbf{H}_k(E_0 R_\Omega \bar{\mathbf{u}}_\Omega) \cdot \mathbf{n}_k dl \\ &+ \bar{\mathbf{r}}_\Omega, \end{aligned} \quad (5)$$

其中, 符号  $R_\Omega$  为重构算子, 它通过分片光滑多项式把网格平均的守恒变量转换成守恒变量的空间分布; 符号  $E_0$  为求解界面  $I_k$  上  $t_n^+ = t_n + 0$  时刻解的近似演化算子;  $\mathbf{H}_k$  为界面  $I_k$  上的通量函数;  $\mathbf{n}_k$  为界面  $I_k$  的外法线单位矢量.

时间方向的离散采用二阶 Runge-Kutta 格式, 且在通量积分采用梯形公式进行回路积分条件下, 时、空二阶的 Lagrange 有限体积格式可表述为

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{u}}_\Omega^{(*)} &= \bar{\mathbf{u}}_\Omega^{(n)} - \frac{\Delta t}{m_\Omega} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^4 \left[ \mathbf{H}_i(E_0^i R_\Omega \bar{\mathbf{u}}_\Omega^n) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \mathbf{H}_{i+1}(E_0^{i+1} R_\Omega \bar{\mathbf{u}}_\Omega^n) \right] \cdot \mathbf{n}_{i,i+1} \Delta l_{i,i+1} \right\} \\ &\quad + \frac{\Delta t}{2} \bar{\mathbf{r}}_\Omega^n, \\ \bar{\mathbf{u}}_\Omega^{(n+1)} &= \frac{1}{2} \bar{\mathbf{u}}_\Omega^{(n)} + \frac{1}{2} \left\{ \bar{\mathbf{u}}_\Omega^{(*)} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\Delta t}{m_\Omega} \left[ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^4 \left[ \mathbf{H}_i(E_0^i R_\Omega \bar{\mathbf{u}}_\Omega^n) \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \mathbf{H}_{i+1}(E_0^{i+1} R_\Omega \bar{\mathbf{u}}_\Omega^n) \right] \cdot \mathbf{n}_{i,i+1} \Delta l_{i,i+1} \right] \right\} \\ &\quad + \frac{\Delta t}{2} \bar{\mathbf{r}}_\Omega^n. \end{aligned} \quad (6)$$

可以看出, 只要给出可以求解网格节点物理量的近似演化算子  $E_0^i$  以及可以求解网格分布物理量的重构方案  $R_\Omega$ , 下一时刻网格中心的物理量  $\bar{\mathbf{u}}_\Omega$  即可求解.

### 3.3 求解网格节点物理量的近似演化算子

爆轰流动控制方程是非线性双曲型方程, 不能获得解析解. 本文中, 近似演化算子利用次特征理论获得, 其基本思想是, 离散方程的网格节点解通过计算关于原始变量的线性化的流动控制方程沿特征方向的理论解来获得, 特别是获得节点的速度和压力解.

关于原始变量的 Lagrange 流动控制方程, 其矢量-矩阵形式的偏微分方程为:

$$\frac{dq}{dt} + \mathbf{A}_1(\mathbf{q}) \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial x} + \mathbf{A}_2(\mathbf{q}) \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial y} = \mathbf{r}_q, \quad (7)$$

式中,

$$q = \begin{bmatrix} \rho \\ u \\ v \\ p \\ \lambda \end{bmatrix}, \quad A_1(q) = \begin{bmatrix} 0 & \rho & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/\rho & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho c_\lambda^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$A_2(q) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \rho & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/\rho & 0 \\ 0 & 0 & \rho c_\lambda^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad r_q = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ r \frac{\partial p}{\partial \lambda} \\ r \end{bmatrix},$$

$c_\lambda^2$  为化学反应冻结声速.

设在某时空点  $\tilde{P} = (\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t})$  处, 有参考状态  $\tilde{q} = (\tilde{\rho}, \tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{p}, \tilde{\lambda})$ . 通过冻结由此参考状态形成的 (7) 式中的 Jacobi 矩阵而进行线性化处理, 得到 (7) 式的常数线性化系统:

$$\frac{d\mathbf{q}}{dt} + \mathbf{A}_1(\tilde{\mathbf{q}}) \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial x} + \mathbf{A}_2(\tilde{\mathbf{q}}) \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial y} = \mathbf{r}_q. \quad (8)$$

为方便求解, (8) 式可以转化成如下的拟对角系统:

$$\frac{d\mathbf{w}}{dt} + \mathbf{A}_1 \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial x} + \mathbf{A}_2 \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial y} = \mathbf{s}, \quad (9)$$

式中,

$$\mathbf{w} = [w_1, w_2, w_3, w_4, w_5]^T$$

$$= \left[ \frac{1}{2} \left( -\frac{p}{\tilde{\rho} \tilde{c}_\lambda} + u \cos \theta + v \sin \theta \right), \rho - \frac{p}{\tilde{c}_\lambda^2}, \right.$$

$$u \sin \theta - v \cos \theta,$$

$$\left. \frac{1}{2} \left( \frac{p}{\tilde{\rho} \tilde{c}_\lambda} + u \cos \theta + v \sin \theta \right), \lambda \right]^T,$$

$$\mathbf{A}_1 = \text{diag}[\lambda_{1,1}, \lambda_{1,2}, \lambda_{1,3}, \lambda_{1,4}, \lambda_{1,5}]$$

$$= \text{diag}[-\tilde{c}_\lambda \cos \theta, 0, 0, \tilde{c}_\lambda \cos \theta, 0],$$

$$\mathbf{A}_2 = \text{diag}[\lambda_{2,1}, \lambda_{2,2}, \lambda_{2,3}, \lambda_{2,4}, \lambda_{2,5}]$$

$$= \text{diag}[-\tilde{c}_\lambda \sin \theta, 0, 0, \tilde{c}_\lambda \sin \theta, 0],$$

$$\mathbf{s} = [s_1, s_2, s_3, s_4, s_5]^T$$

$$= \left[ \frac{\tilde{c}_\lambda}{2} \left( \sin \theta \frac{\partial w_3}{\partial x} - \cos \theta \frac{\partial w_3}{\partial y} \right) + \frac{r}{2} \frac{\partial p}{\partial \lambda}, \right.$$

$$- \frac{r}{\tilde{c}_\lambda^2} \frac{\partial p}{\partial \lambda}, \tilde{c}_\lambda \sin \theta \left( \frac{\partial w_1}{\partial x} - \frac{\partial w_4}{\partial x} \right)$$

$$\left. - \tilde{c}_\lambda \cos \theta \left( \frac{\partial w_1}{\partial y} - \frac{\partial w_4}{\partial y} \right), \right]$$

$$- \frac{\tilde{c}_\lambda}{2} \left( \sin \theta \frac{\partial w_3}{\partial x} - \cos \theta \frac{\partial w_3}{\partial y} \right) - \frac{r}{2} \frac{\partial p}{\partial \lambda}, r \Big]^T.$$

由偏微分方程相关理论可知, 给定  $\tilde{t}$  时刻初始条件, 则任意点  $P = (x, y, \tilde{t} + \tau)$  处的  $w_l$  ( $l = 1, 2, 3, 4, 5$ ) 的解可以表达成

$$w_l(x, y, \tilde{t} + \tau, \theta)$$

$$= w_l[x - \lambda_{1,l}(\theta)\tau, y - \lambda_{2,l}(\theta)\tau, \tilde{t}]$$

$$+ \int_{\tilde{t}}^{\tilde{t} + \tau} s_l[x - \lambda_{1,l}(\theta)(\tilde{t} + \tau - \xi),$$

$$y - \lambda_{2,l}(\theta)(\tilde{t} + \tau - \xi), \xi] d\xi. \quad (10)$$

对任意给定的角度  $\theta$ , 从点  $P(x, y, \tilde{t} + \tau)$  引出五条次特征线  $C_l(\theta)$ , 其几何关系见图 4 所示.  $C_1(\theta)$  或  $C_4(\theta)$  从角度 0 到  $2\pi$  构成次特征锥, 而  $C_2(\theta)$ ,  $C_3(\theta)$  或  $C_5(\theta)$  垂直于初始平面  $\tilde{P}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t})$  构成的锥底平面. 定义  $C_l(\theta)$  与初始平面  $\tilde{P}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t})$  的交点为  $Q_l(\theta)$ , 则有  $Q_4(\theta) = Q_1(\theta + \pi)$ , 且  $Q_1(\theta)$  和  $Q_4(\theta)$  位于圆心为  $(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t})$ 、半径为  $\tilde{c}_\lambda \tau$  的圆上; 而  $Q_2(\theta) = Q_3(\theta) = Q_5(\theta)$ , 且  $Q_2(\theta)$ ,  $Q_3(\theta)$  和  $Q_5(\theta)$  位于圆锥底圆心点  $(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t})$  上; 并且各交点具有关系式:  $Q_{1,4}(\theta) = (x \pm \tilde{c}_\lambda \tau \cos \theta, y \pm \tilde{c}_\lambda \tau \sin \theta, \tilde{t})$ ,  $Q_{2,3,5}(\theta) = (x, y, \tilde{t})$ .

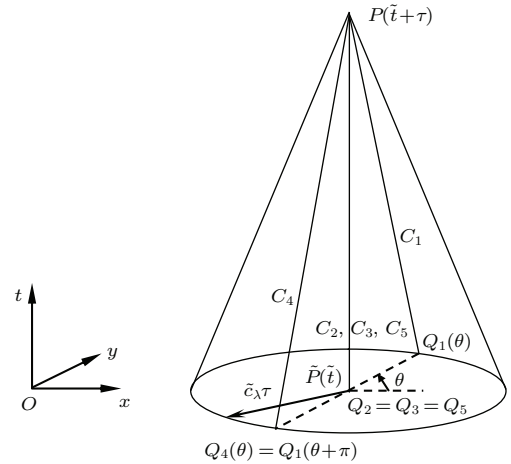


图 4 次特征锥示意图

Fig. 4. Subcharacteristic cone.

利用这些关系, (10) 式可以写成

$$w_l(P, \theta) = w_l[Q_l(\theta)]$$

$$+ \int_{\tilde{t}}^{\tilde{t} + \tau} s_l[x - \lambda_{1,l}(\theta)(\tilde{t} + \tau - \xi),$$

$$y - \lambda_{2,l}(\theta)(\tilde{t} + \tau - \xi), \xi] d\xi. \quad (11)$$

左乘矩阵  $\mathbf{A}_1(\mathbf{q}) \cos \theta + \mathbf{A}_2(\mathbf{q}) \sin \theta$  的右特征矩阵, 再设  $\mathbf{n} = (\cos \theta, \sin \theta)$ , 并从 0 到  $2\pi$  对 (11) 式求

积分, 可以获得原始变量的理论解, 对速度和压力的积分形式解为

$$u(P) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left[ -\frac{p(Q_1)}{\tilde{\rho}\tilde{c}_\lambda} \cos\theta + u(Q_1) \cos^2\theta + v(Q_1) \sin\theta \cos\theta \right] d\theta + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_{\tilde{t}}^{\tilde{t}+\tau} S[\mathbf{z} + \tilde{c}_\lambda(\tilde{t} + \tau - \xi)\mathbf{n}(\theta), \xi, \theta] \cos\theta d\xi d\theta + \frac{1}{2} u(\tilde{P}) - \frac{1}{2\tilde{\rho}} \int_{\tilde{t}}^{\tilde{t}+\tau} \frac{\partial p(\mathbf{z}, \xi)}{\partial x} d\xi, \quad (12)$$

$$v(P) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left[ -\frac{p(Q_1)}{\tilde{\rho}\tilde{c}_\lambda} \sin\theta + u(Q_1) \cos\theta \sin\theta + v(Q_1) \sin^2\theta \right] d\theta + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_{\tilde{t}}^{\tilde{t}+\tau} S[\mathbf{z} + \tilde{c}_\lambda(\tilde{t} + \tau - \xi)\mathbf{n}(\theta), \xi, \theta] \sin\theta d\xi d\theta + \frac{1}{2} v(\tilde{P}) - \frac{1}{2\tilde{\rho}} \int_{\tilde{t}}^{\tilde{t}+\tau} \frac{\partial p(\mathbf{z}, \xi)}{\partial y} d\xi, \quad (13)$$

$$p(P) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} [p(Q_1) - \tilde{\rho}\tilde{c}_\lambda u(Q_1) \cos\theta - \tilde{\rho}\tilde{c}_\lambda v(Q_1) \sin\theta] d\theta - \frac{1}{2\pi} \tilde{\rho}\tilde{c}_\lambda \int_0^{2\pi} \int_{\tilde{t}}^{\tilde{t}+\tau} S[\mathbf{z} + \tilde{c}_\lambda(\tilde{t} + \tau - \xi)\mathbf{n}(\theta), \xi, \theta] d\xi d\theta, \quad (14)$$

式中,

$$S(\mathbf{z}, t, \theta) = -\frac{\tilde{c}_\lambda}{2} \left[ \frac{\partial u(\mathbf{z}, t, \theta)}{\partial y} + \frac{\partial v(\mathbf{z}, t, \theta)}{\partial x} \right] \sin 2\theta + \tilde{c}_\lambda \left[ \frac{\partial v(\mathbf{z}, t, \theta)}{\partial y} \cos^2\theta + \frac{\partial u(\mathbf{z}, t, \theta)}{\partial x} \sin^2\theta \right],$$

$$\mathbf{z} = (x, y).$$

在离散网格中, 假设点  $\tilde{P} = (\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t})$  是  $M$  个网格的公共节点,  $\theta_{ka}$  和  $\theta_{kb}$  为第  $k(k \leq M)$  个网格中以  $\tilde{P}$  为公共节点的两条边与  $x$  轴的夹角, 对上式中的压力梯度项和源项的时间积分进行显式处理, 并考虑到离散过程只须获得  $\mathbf{q}(P)$  在  $\tilde{t}$  初始时刻下无限小时间内的演化解, 则可知显式处理后源项的积分为零, 再注意到离散过程中  $\mathbf{q}(Q_1)$  在每个网格内为常数, 则速度和压力有如下简化形式的解:

$$u(P) = \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^M \left[ -\frac{p_k}{\tilde{\rho}\tilde{c}_\lambda} (\sin\theta_{kb} - \sin\theta_{ka}) \right.$$

$$\left. + u_k \left( \frac{\theta_{kb} - \theta_{ka}}{2} + \frac{\sin 2\theta_{kb} - \sin 2\theta_{ka}}{4} \right) - v_k \frac{\cos 2\theta_{kb} - \cos 2\theta_{ka}}{4} \right], \quad (15)$$

$$v(P) = \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^M \left[ \frac{p_k}{\tilde{\rho}\tilde{c}_\lambda} (\cos\theta_{kb} - \cos\theta_{ka}) - u_k \frac{\cos 2\theta_{kb} - \cos 2\theta_{ka}}{4} + v_k \left( \frac{\theta_{kb} - \theta_{ka}}{2} - \frac{\sin 2\theta_{kb} - \sin 2\theta_{ka}}{4} \right) \right], \quad (16)$$

$$p(P) = \frac{1}{2\pi} \sum_{k=1}^M [p_k(\theta_{kb} - \theta_{ka}) - \tilde{\rho}\tilde{c}_\lambda u_k (\sin\theta_{kb} - \sin\theta_{ka}) + \tilde{\rho}\tilde{c}_\lambda v_k (\cos\theta_{kb} - \cos\theta_{ka})]. \quad (17)$$

### 3.4 求解网格分布物理量的重构方案

本文中, 重构方案采用分片性插值进行. 在  $t_n$  时刻, 对每个网格内的物理量进行线性插值即可获得该网格内任意位置处的物理量分布, 并且线性插值方式保证空间离散具有二阶精度.

对于原始变量  $\mathbf{q}$ , 构造线性插值公式:

$$q_{ij}(X) = \bar{q}_{ij}^n + L(\nabla \mathbf{q})_{ij} \cdot (X - X_{ij}^n),$$

其中,  $X_{ij}^n$  为控制体  $\Omega_{ij}$  在  $t_n$  时刻的形心位置,  $\bar{q}_{ij}^n$  为控制体  $\Omega_{ij}$  的原始变量平均值,  $(\nabla \mathbf{q})_{ij}$  为控制体  $\Omega_{ij}$  内的常变量梯度, 可由高斯公式计算得到, 即

$$(\nabla \mathbf{q})_{ij} \approx \frac{1}{A_\Omega} \sum_{k=1}^4 \mathbf{q}_k^n \mathbf{n}_k \Delta l_k,$$

$L$  为用于保证插值单调性的梯度限制器, 这里取

$$L(a, b) = \frac{\max(ab, 0)(a+b)}{a^2 + b^2}.$$

### 3.5 数值计算方法验证

数值模拟 PBX9502 炸药平面一维定常爆轰波结构问题. 选取炸药计算域长度为 5.0 cm, 左端以 CJ 条件起爆. 计算获得爆轰达到定常状态时化学反应区内的压力和速度分布, 见图 5 所示, 图中所用离散网格为  $\Delta x = 1/100, 1/200, 1/500, 1/1000$  cm. 从计算结果看出, 随着网格加密, 数值解逐渐逼近精确解, 格式的收敛性良好; 爆轰前导冲击波间断附近没有出现非物理振荡, 格式的分辨率良好; 当采用  $\Delta x = 1/200$  cm 或更小的网格时, 计算获得的数值解与精确解符合良好<sup>[9]</sup>. 从该算例可以看出, 本文使用的有限体积计算方法是可靠的.



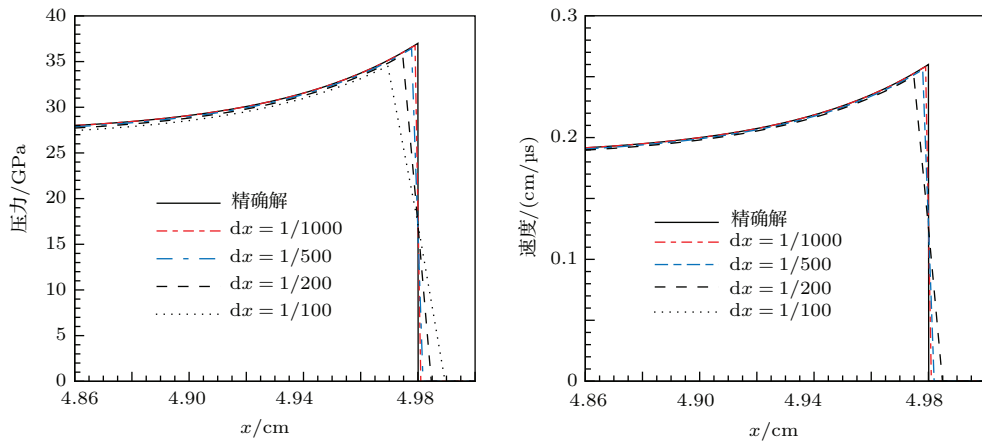


图5 PBX9502炸药化学反应区内物理量分布

Fig. 5. Profile of typical variables in chemical reaction zone for PBX9502 explosive.

#### 4 爆轰波折射的数值模拟分析

Aveille [5] 进行的T2炸药爆轰波与铜板折射作用数值模拟实验. 实验中, 一个平面定常爆轰波斜入射到0.2 cm厚的铜板上, 通过高速扫描相机获取不同入射角下铜板内折射冲击波阵面与自由表面的夹角, 借助冲击波 Rankine-Hugoniot 关系式推导出铜板内部折射冲击压力.

数值模拟的计算域如图6所示. 炸药和铜板的长度均取7.0 cm, 厚度分别取2.0 cm和0.2 cm; 图中阴影部分为给定的以炸药CJ状态起爆的初始条件, 炸药与Cu的交界面设置了单纯滑移线 [10], 其他边界条件均设为自由面; 铜板被视为可压缩物质; 离散网格划分为  $\Delta x = \Delta y = 1/200$  cm. 炸药的主要参数为: 密度  $1.855 \text{ g/cm}^3$ , CJ爆速  $0.77 \text{ cm}/\mu\text{s}$ , CJ爆压  $29.0 \text{ GPa}$ , 爆轰产物多方指数为 2.79; 铜介质的主要参数为: 密度  $8.93 \text{ g/cm}^3$ , 标准状态声速  $0.39 \text{ cm}/\mu\text{s}$ .

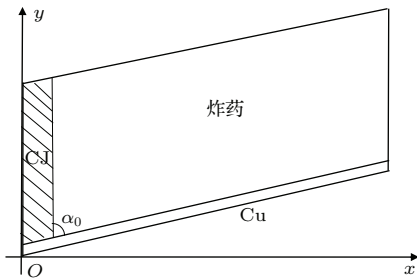


图6 数值模拟爆轰波折射的计算条件

Fig. 6. Computational condition about refraction of detonation wave.

采用上节的数值模拟方法, 计算给出铜介质折射冲击作用点处 (标注 “Num\_1” 的值) 以及铜介质

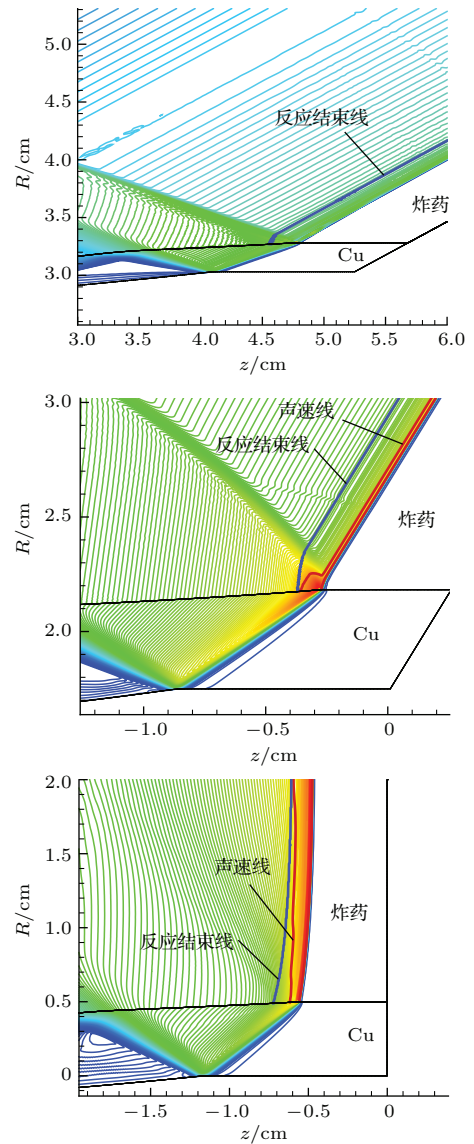


图7 三种典型入射角下的爆轰波折射类型

Fig. 7. Typical flowfield of three kinds of refraction styles.

自由表面处(标注“Num\_2”的值)的压力变化,也显示在图1中,可以看出,折射冲击作用点处压力值与改进爆轰波极曲线理论值符合良好,自由表面处压力值与实验结果符合良好.

数值模拟也给出入射角为 $30^\circ$ ,  $60^\circ$ ,  $90^\circ$ 条件下的三种爆轰波折射类型流场特征,见图7所示,可以看出,折射类型分别是:反射冲击波的正规折射、带Mach反射的非正规折射、无反射波的正规折射,与改进爆轰波极曲线理论给出的折射类型一致.值得指出的是, $60^\circ$ 入射时出现带Mach反射的非正规折射现象得到相关的爆轰波反射实验证实<sup>[11]</sup>;  $90^\circ$ 入射时出现无反射波的正规折射现象得到相关的金属约束高能钝感炸药爆轰实验确认<sup>[12,13]</sup>.可以认为,改进爆轰波极曲线理论分析结果与数值模拟结果和实验结果均符合.

数值模拟同时给出入射角为 $30^\circ$ ,  $60^\circ$ ,  $90^\circ$ 条件下铜介质内沿折射冲击波长度方向上的压力变化,见图8所示,可以看出, $30^\circ$ 时压力呈线性下降趋势; $60^\circ$ 时压力呈两段线性下降趋势; $90^\circ$ 时压力值先急剧下降,随后呈线性下降趋势,这些下降趋势同改进爆轰波极曲线理论分析结果一致,反映出爆轰化学反应膨胀及Taylor稀疏波对折射冲击波强度的衰减影响很大.

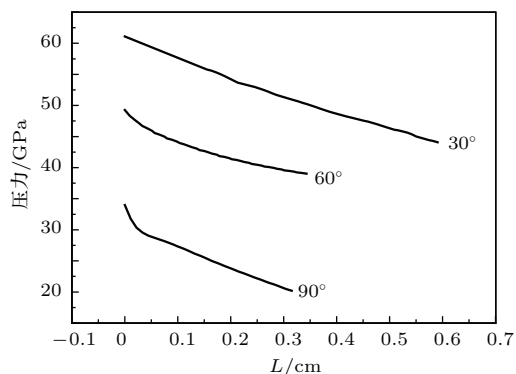


图8 三种典型入射角条件下金属折射冲击波上的压力变化  
Fig. 8. Pressure attenuation with shock length under three incident angles.

## 5 结 论

1) 本文提出的改进爆轰波极曲线理论用来理论分析爆轰波在炸药-金属界面上的折射问题,给出了爆轰波折射的三种类型以及金属折射冲击作用点处的压力变化,并指出爆轰化学反应膨胀和Taylor稀疏波引起的衰减使得金属自由表面处的压力值显著低于金属折射冲击作用点处压力值.

2) 本文发展的一个数值求解爆轰反应流动方程的高精度中心型Lagrange方法用来数值模拟分析爆轰波在炸药-金属界面上的折射问题,给出了金属折射冲击作用点处以及金属自由表面处的压力变化、三种爆轰波折射类型的流场特征、金属介质内沿折射冲击波长度方向上的压力衰减变化.

3) 改进爆轰波极曲线理论给出的爆轰波折射类型与数值模拟结果和实验结果一致,可以确认爆轰波折射类型有三种:反射冲击波的正规折射、带Mach反射的非正规折射、无反射波的正规折射,特别地,无反射波的正规折射是经典爆轰波极曲线理论不能预测的折射类型;数值模拟给出的金属折射冲击作用点处的压力变化与改进爆轰波极曲线理论结果符合,金属自由表面处的压力变化与实验结果符合,可以确认金属折射冲击波压力值随入射角增大而单调减小,尽管存在带Mach反射的非正规折射,但金属折射冲击波压力值突然增大的现象不会出现.

## 参考文献

- [1] Sternberg H M, Piacesi D 1966 *J. Phys. Fluids* **9** 1307
- [2] Wang J H 1982 *Explosion and Shock Wave* **2** 1 (in Chinese) [王继海 1982 爆炸与冲击 **2** 1]
- [3] Cheret R, C. R. Acad. Sc. Paris, T. 303, Serie II, No. 1, 1986
- [4] Walsh J M, *Shock Waves in Condensed Matter*, 1987, Elsevier Science Publisher B. V. , 3
- [5] Aveille J 1989 *9th Symposium (International) on Detonation*, Portland, Oregon, 842-851
- [6] Tarver C M, McGuire E M 2002 *12th Symposium (International) on Detonation*, San Diego, California, 641-649
- [7] Zhao Y H, Liu H F 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4791 (in Chinese) [赵艳红, 刘海风 2007 物理学报 **56** 4791]
- [8] Sun Y T, Jia Z P, Yu M 2012 *Chinese J. Comp. Phys.* **29** 45 (in Chinese) [孙宇涛, 贾祖朋, 于明 2012 计算物理 **29** 45]
- [9] Sun C W 2000 *Applied Detonation Physics* (Beijing: Defense Industry Press) (in Chinese) [孙承伟 2000 应用爆轰物理 (北京: 国防工业出版社)]
- [10] Wilkins M L 1963 ADA395185, California University Livermore Radiation Laboratory
- [11] Zhang B P, Jiang C L 1992 *Trans. Beijing Institute of Technology* **1** 26 (in Chinese) [张宝坪, 姜春兰 1992 北京理工大学学报 **1** 26]
- [12] Zhao F 2009 *Physics* **38** 894 (in Chinese) [赵锋 2009 物理 **38** 894]
- [13] Yu M, Zhang W H 2014 *Explosion and Shock Wave* **34** 300 (in Chinese) [于明, 张文宏 2014 爆炸与冲击 **34** 300]

# Analysis on refraction of detonation wave at the explosive-metal interface<sup>\*</sup>

Yu Ming Sun Yu-Tao Liu Quan<sup>†</sup>

(National Key Laboratory of Computational Physics, Institute of Applied Physics and Computational Mathematics,  
Beijing 100094, China)

( Received 11 September 2014; revised manuscript received 30 November 2014 )

## Abstract

This paper analyzes theoretically and numerically the refraction phenomenon of detonation wave at the explosive-metal interface, motivated by the problem that there exist large discrepancies between the experimental results and the classical shock polar theory. After pointing out the major defects of the classical shock polar theory based on CJ model of detonation, an improved shock polar theory based on ZND model of detonation is presented to give the styles of the refraction of detonation wave and the pressure values at the interaction point between the refracted shock wave and the incident shock wave, to show the pressure values at free-surface of copper remarkably lower than the ones at the shock interaction point due to the attenuation effects from the chemical reaction expansion and the following Taylor rarefaction. A second-order cell-centered Lagrangian hydrodynamics method with high resolution based on the subcharacteristics theory is developed to solve the reactive flow equations of detonation in condensed explosive, and then to numerically simulate a representative refraction experiment about T2 explosive interacting with copper. The simulated pressure values at the interaction point agree well with the ones from the improved shock polar theory, and the simulated pressure values at free-surface of copper agree well with the experimental values, meanwhile, the refraction styles predicted by the improved shock polar theory are confirmed by the numerically simulated flowfield images. From the theoretical and numerical results, there exist three kinds of refraction styles of detonation waves at explosive-metal interface: i) the regular refraction with reflecting shock wave, ii) the irregular refraction with Mach reflection, and iii) the regular refraction without any reflecting wave; in particular, the regular refraction with no reflecting wave is a kind of refraction style unable to be predicted by the classical shock polar theory, meanwhile, the pressure values at the free-surface and the interaction point inside the shocked metal both monotonically decrease with the increase of the incident angle.

**Keywords:** detonation wave, refraction, shock polar theory, ZND model

**PACS:** 47.4Rs, 40.40.Nm, 47.70.Fw, 82.4Fp

**DOI:** [10.7498/aps.64.114702](https://doi.org/10.7498/aps.64.114702)

---

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11272064).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [liuquan@iapcm.ac.cn](mailto:liuquan@iapcm.ac.cn)