

贴体坐标系中非理想爆轰波阵面传播计算的一个问题*

钟 敏¹, 陈森华¹, 李 平²

(1. 中国工程物理研究院流体物理研究所, 四川绵阳 621900;

2. 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)

摘要: 研究在贴体坐标系中采用 Level Set 方法计算多维非理想爆轰波阵面传播问题, 根据 Hamiltom-Jacobi 方程的 Godunov 差分格式, 提出了非正交的贴体坐标系中 Level Set 函数方程的差分格式及其相应的数值方法。最后给出了几个典型数值算例, 并且与解析结果进行了比较。

关键词: 非理想爆轰; Level Set 方法; 贴体坐标系

中图分类号: O241.3

文献标识码: A

1 引 言

DSD(爆轰冲击波动力学)理论给出的爆速曲率关系是对弯曲爆轰波传播规律的最简洁描述, 而对于曲率相关的界面运动问题, 采用 Level Set(LS)方法有诸多的便利之处, Aslam^[1] 首先使用 LS 方法解爆速曲率关系确定爆轰波阵面的 Hamiltom-Jacobi(HJ)方程, 得到了立方体炸药多点起爆的波阵面形状。Aslam 给出的差分格式仅适用于直角坐标系。在大多数情况, 爆轰阵面并非封闭曲面, 需要加入适当的边界条件方程方可求解, 同时在一般情况下, 炸药都包含弯曲边界。因此在求解 LS 函数方程时几乎都必须在弯曲表面处理边界条件。在直角坐标系中, 计算使用的方法, 不可能使所有结点都在给定的曲面上, 这就使边界条件的处理变得很困难, 而且使计算精度受影响。陈森华等^[2] 提出采用贴体坐标系来简化边界条件处理的方法, 可以处理较为复杂的边界条件, 但给出的差分形式用于非正交网格中的 LS 函数方程时, 仅适用于方程中的交叉项影响较小的情形。本研究提出了新的数值方法, 并对计算方法进行了数值验证。

2 贴体坐标系下非理想爆轰波阵面传播方程的差分形式

2.1 贴体坐标系下的非理想爆轰波阵面传播方程

Osher 等^[3] 提出了计算曲率相关的界面运动问题的 LS 方法, 在直角坐标系中波阵面满足方程 $\vec{\psi}(x, t) = 0$, LS 方法的主要工作是根据初始条件求解确定 ψ 的偏微分方程

$$\psi_t + D_n(\kappa) |\nabla \psi| = 0 \quad (1)$$

式中: $D_n(\kappa)$ 是阵面传播速度在法线方向的分量, κ 是阵面的中值曲率。令 D_{cj} 为理想爆轰爆速, (1) 式忽略高阶项的简化形式可写为

$$\psi_t + D_{cj} |\nabla \psi| = \alpha \kappa |\nabla \psi| \quad (2)$$

由于曲率的计算中, 含有 ψ 对于空间坐标的二阶偏导数, 不可表示为 HJ 类型方程的形式。因此, 对方

* 收稿日期: 2005-06-01; 修回日期: 2005-09-08

基金项目: 中国工程物理研究院预先研究基金(2003-421050501-1-05)

作者简介: 钟 敏(1973—), 男, 硕士, 主要从事计算流体力学的理论和数值方法研究。E-mail: zhong_min@tom.com

程两边分开计算。方程右边为抛物项,可采用中心差分计算;方程左边,根据 HJ 类型方程的通用方法数值离散。

为叙述简单起见,以二维为例,可推广到三维。在二维情况下引进坐标变换^[2]

$$\begin{aligned}\xi &= F(x, y) \\ \eta &= G(x, y)\end{aligned}\quad (3)$$

于是有

$$|\nabla\psi| = \sqrt{(\psi_\xi F_x + \psi_\eta G_x)^2 + (\psi_\xi F_y + \psi_\eta G_y)^2} \quad (4)$$

展开合并同类项后可以写为

$$|\nabla\psi| = \sqrt{a_1(\psi_\xi)^2 + a_2(\psi_\eta)^2 + 2a_4\psi_\xi\psi_\eta} \quad (5)$$

式中

$$a_1 = (F_x)^2 + (F_y)^2, \quad a_2 = (G_x)^2 + (G_y)^2, \quad a_4 = F_x G_x + F_y G_y$$

只考虑方程(2)的左边,可以表示为 (ξ, η) 坐标系下的 HJ 类型偏微分方程

$$\psi_t + H(\psi_\xi, \psi_\eta) = 0 \quad (6)$$

式中

$$H(u, v) = D_{\text{cj}} \sqrt{a_1 u^2 + a_2 v^2 + 2a_4 uv} \quad (7)$$

当 a_4 项非零时, (6) 式中出现了交叉项, 增加了数值计算难度。

2.2 差分格式

差分计算需将方程(6)数值离散, 对 HJ 方程(6), 时间采用 Euler 向前差分的数值离散后可以表示为^[4]

$$\frac{\psi^{n+1} - \psi^n}{\Delta t} + \hat{H}^n(\psi_\xi^-, \psi_\xi^+; \psi_\eta^-, \psi_\eta^+) = 0 \quad (8)$$

$\hat{H}^n(\psi_\xi^-, \psi_\xi^+; \psi_\eta^-, \psi_\eta^+)$ 需满足相容性条件 $\hat{H}^n(\psi_\xi, \psi_\xi; \psi_\eta, \psi_\eta) = H(\psi_\xi, \psi_\eta)$, 其中 $\psi^\pm$ 等项可以为一阶精度的向前或向后差分, 也可以采用文献[2]中的 ENO 格式, 时间离散还可以采用高阶的 Runge Kutta 格式, ψ^{n+1} 满足单调性条件由 (ξ, η) 坐标系下的 CFL 稳定性条件保证。

文献[1]中给出了方程(6)的一种空间差分格式, 但用于非正交网格中的 LS 函数方程时, 仅适用于方程中的交叉项影响较小的情形。需要改进空间差分格式。

文献[4]中给出了两种单调格式, 即 Roe-Fix 格式(RF 格式)和 Godunov 格式。我们选择不含数值耗散项的 Godunov 的差分格式, 对于 HJ 方程(6), 按文献[4]中的定义给出的二维 Godunov 格式为

$$\hat{H} = \text{ext}_\xi \text{ext}_\eta H(\psi_\xi, \psi_\eta) \quad (9)$$

ext_ξ 定义如下:

如 $\psi_\xi^- < \psi_\xi^+$, 则 $\text{ext}_\xi H$ 取为 H 的最小值, ψ_ξ 的取值范围为 $\psi_\xi \in I^\xi$;

如 $\psi_\xi^- > \psi_\xi^+$, 则 $\text{ext}_\xi H$ 取为 H 的最大值, ψ_ξ 的取值范围为 $\psi_\xi \in I^\xi$;

$I^\xi = [\psi_\xi^{\min}, \psi_\xi^{\max}]$, 由相应计算节点上的 ψ_ξ^+ 和 ψ_ξ^- 给定。

类似地可定义 ext_η 和 I^η , 对于方程(6), 一般情况下, 有

$$\text{ext}_\xi \text{ext}_\eta H(\psi_\xi, \psi_\eta) \neq \text{ext}_\eta \text{ext}_\xi H(\psi_\xi, \psi_\eta) \quad (10)$$

因此, 只有在确定了操作顺序后, 一般情况的 Godunov 格式才是唯一的。

文献[4]中只给出了直角坐标系中的具体差分形式, 略微变化后可用于正交的贴体坐标系, 但不适用于非正交的贴体坐标系。这里给出非正交的贴体坐标系中方程(6)的 Godunov 差分格式计算方法。

根据(7)式, $\text{ext}_\eta H(u, v) = f(u)$ 只能有下面 3 种可能的形式:

(1) 当 $v = \psi_\eta^-$ 时,

$$f_1(u) = D_{\text{cj}} \sqrt{a_1 u^2 + 2a_4 \psi_\eta^- u + a_2 (\psi_\eta^-)^2}$$

(2) 当 $v = \psi_\eta^+$ 时,

$$f_2(u) = D_{c_j} \sqrt{a_1 u^2 + 2a_4 \phi_\eta^+ u + a_2 (\phi_\eta^+)^2}$$

(3) 当 $v = -(a_4/a_2)u$ 时,

$$f_3(u) = D_{c_j} \sqrt{(a_1 - 2a_4^2/a_2)u^2}$$

于是可知能使 $H(u, v) = \text{ext}_\xi \text{ext}_\eta H(u, v)$ 的 $u \in I^\xi$ 必定为下面 3 种情况之一:

- ① u 位于 I^ξ 的两端
- ② 有一个 $f_i(u)$ 对 u 的导数为零或 $f_i(u) = 0, i = 1, 2, 3$
- ③ 存在 $i \neq j, f_i(u) = f_j(u), i = 1, 2, 3, j = 1, 2, 3$

由此,可推出只有当 u 为以下几个特定值之一时, $H(u, v)$ 的值才有可能满足 $\text{ext}_\xi \text{ext}_\eta H(\phi_\xi, \phi_\eta)$ 的定义。

$$\begin{aligned} u &= \phi_\xi^-, \quad u = \phi_\xi^+, \quad u = -a_4 \phi_\eta^- / a_1, \quad u = -a_4 \phi_\eta^+ / a_1 \\ u &= 0, \quad u = -a_2 \phi_\eta^- / a_4, \quad u = -a_2 \phi_\eta^+ / a_4, \quad u = -a_2 (\phi_\eta^- + \phi_\eta^+) / 2a_4 \end{aligned} \quad (11)$$

从中选出符合 $u \in I^\xi$ 的点, 计算出相应的 $\text{ext}_\eta H(u, v)$, 根据 Godunov 格式定义就能得出确定的操作顺序下唯一的 $\hat{H} = \text{ext}_\xi \text{ext}_\eta H(\phi_\xi, \phi_\eta)$ 。

如果在计算节点上, 有 $\partial H / \partial u = H_1(\phi_\xi, \phi_\eta)$ 和 $\partial H / \partial v = H_2(\phi_\xi, \phi_\eta)$ 的符号不变, 不难证明这时的 Godunov 格式取值与迎风型格式一致。

用类似的方法, 还推导了方程(6)在三维贴体坐标系中的 Godunov 差分格式。

2.3 曲率计算

小曲率爆轰波传播问题的方程(2)的右边, 含有带有曲率的项, 因 ϕ 为 LS 函数, 计算所用的曲率可采用隐函数曲率计算公式

$$\kappa = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right) \quad (12)$$

如果采用二维程序计算轴对称模型, 需要将(12)式计算出的二维曲率转换为旋转体的三维曲率。在以 y 坐标轴为旋转轴的轴对称模型中, 可以采用下式计算其曲率

$$\kappa_{3d} = \frac{\left(\kappa_{2d} + \frac{\phi_x}{x |\nabla \phi|} \right)}{2} \quad (13)$$

3 窄带计算和重新初始化

对于爆轰波传播问题, 符号距离函数便于波阵面后反应区的处理, 计算中选取的 LS 函数为符号距离函数。在经过几个时间步的计算后, 所得到的 LS 函数会偏离符号距离函数, 需要进行修正。文献[5]中通过迭代求解如下偏微分方程得到符号距离函数 d 实现重新初始化, 然后令相应计算节点上的 $\phi = d$ 将 LS 函数重置为保持波阵面位置的符号距离函数。

$$\begin{cases} d_\tau + \text{sign}(d_0)(|\nabla d| - 1) = 0 \\ d(x, 0) = d_0(x) = \phi(x, t) \end{cases} \quad (14)$$

计算中 $\text{sign}(d)$ 光滑化为 $\text{sign}(d) = S_\epsilon(d_0) = d / \sqrt{d^2 + \epsilon^2}$ 。

在二维贴体坐标系中(14)式中的方程可以表示为 (ξ, η) 坐标系中的 HJ 类型偏微分方程, 因此可采用(9)式的方法离散 $S(d_0)(|\nabla d| - 1)$, 通过几个时间步长的迭代给出 d 。

LS 函数在整个计算网格区域内定义, 方程和重新初始化方程在整个网格中求解, 带来的计算量非常大。而在实际的计算模型中, 所用到的 ϕ 值往往局限于波阵面的一个邻近区域内, 而下一时刻的阵面位置可由波阵面附近几个计算网格内的格点上的 ϕ 值确定。计算中, 可以仅计算波阵面附近一个窄带内的计算节点上的 LS 函数值来提高运算效率。

为实现窄带计算, Peng 等人^[5]引入计算常量 $0 < \beta < \gamma$ 利用截断函数 $c(\phi)$ 如下

$$c(\phi) = \begin{cases} 1 & |\phi| \leq \beta \\ (|\phi| - \gamma)^2 (2|\phi| + \gamma - 3\beta) / (\gamma - \beta)^3 & \beta < |\phi| \leq \gamma \\ 0 & |\phi| > \gamma \end{cases} \quad (15)$$

将 Level Set 函数 ψ 的偏微分方程(1)变化为

$$\phi_t + c(\psi)D_n(\kappa) |\nabla\psi| = 0 \quad (16)$$

通过差分计算完成一个时间步长的计算后,由于波阵面的推进不会超过一个网格,因此将当前的计算区域向外延伸一个网格后进行重新初始化消除窄带计算的影响。

4 计算结果与讨论

为验证格式的有效性,建立对于方程(2)的非正交网格下的计算模型,初始起爆点为坐标原点,初始半径为 10 mm。对于未到达边界的中心一点起爆模型,预期的计算结果应为半径为 r 的球面(圆形)。采用忽略高阶项的简化形式爆速曲率关系, r 可用解析表达式求得。计算结果的长度单位统一为毫米(mm),时间单位统一为微秒(μs)。二维计算网格数为 121×161 ,三维网格数为 $121 \times 121 \times 161$ 。

图 1 和图 2 分别为采用文献[2]和本文的差分格式计算出的爆轰波阵面。图 3 为两个阵面的局部对比图,图中虚线为采用文献[2]格式的计算结果,实线为采用本文格式的结果。从图中可见采用文献[2]格式时,波阵面上出现了不合理的尖突,而本文的格式在非正交网格中得到了合理的光滑波阵面。分析原因为,在非正交网格中,当交叉项影响较大时,文献[2]中的差分格式出现局部失稳。图 3 为三维计算结果。表 1 为数值计算结果与解析计算结果比较。表 1 中为计算初始半径为 10 的一点起爆模型的 $t=3.0$ 时的波阵面半径, r_{q} 为理想爆轰的阵面半径, r 为解析表达式计算出的波阵面半径。 r_2 和 r_3 分别为二维数值计算结果和三维数值计算结果。计算长度单位为毫米(mm),时间单位为微秒(μs)。

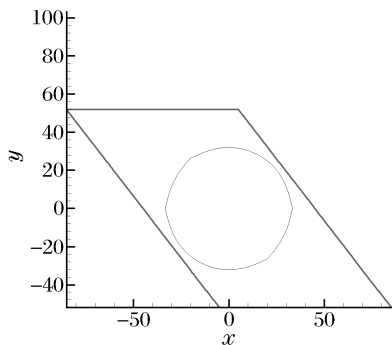


图 1 文献[2]中格式计算结果 $t=3.0$

Fig. 1 Results based on algorithm in Ref. [2] at $t=3.0$

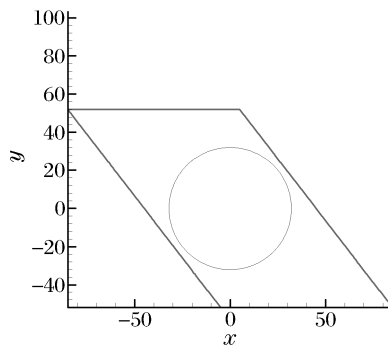


图 2 本文格式计算结果 $t=3.0$

Fig. 2 Results based on algorithm in this paper at $t=3.0$

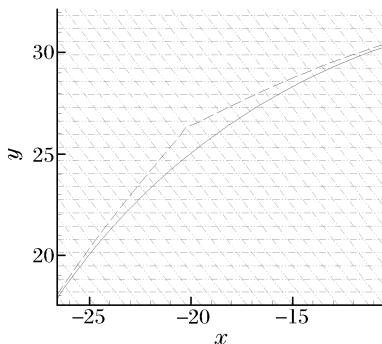


图 3 局部对比图 $t=3.0$

Fig. 3 Numerical results comparison of zooming local area

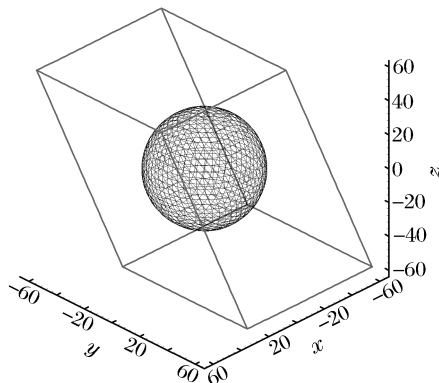


图 4 三维计算结果 $t=3.0$

Fig. 4 Numerical results of the three-dimensional computations

表 1 计算结果比较

Table 1 Numerical results comparision

r_{c_j}	r	r_2	r_3
33.130 00	32.054 88	32.041 62	32.037 08

计算了二维非正交非一致的网格中的一点起爆模型,计算网格为 121×121 。图 5 为计算开始时的初始状态, $\psi = -6.99$ 和 $\psi = 6.99$ 之间的区域为计算开始时的窄带区域。从图 6 可以看出,计算后期的波阵面位置已经远远超出计算初始的窄带区域,但结合重新初始化方法的窄带计算对波阵面位置并无实质影响。图 6 中 $t = 3.0$ 时的波阵面半径平均为 $r_2 = 32.0432$,误差范围小于 0.06% ,对比表 1,可见不同的计算网格在网格尺度差异不大的时候,计算结果差别在合理范围内。在不同的二维和三维计算网格的数值计算结果相对于理想爆轰的波阵面有合理的滞后,和解析计算结果是一致的,可以认为本工作的差分格式、计算方法和计算程序是正确的。

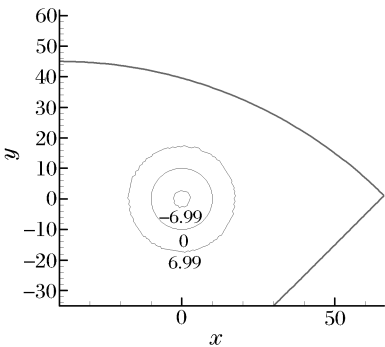


图 5 初始状态
($\psi = \pm 6.99$ 间的区域为计算开始时的窄带区域)
Fig. 5 Initially state computation is only performed
on the region between $\psi = \pm 6.99$

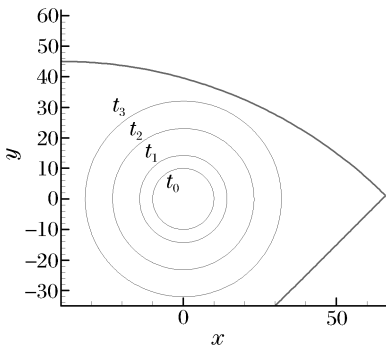


图 6 各个时刻的波阵面
($t_0 = 0.0, t_1 = 0.6, t_2 = 1.8, t_3 = 3.0$)
Fig. 6 Zero contour of ψ at several times
($t_0 = 0.0, t_1 = 0.6, t_2 = 1.8, t_3 = 3.0$)

References:

[1] Aslam T, Bdzil J, Stewart S. Level Set Methods Applied to Modeling Detonation Shock Dynamics [J]. J Comp Phys, 1996, 126: 390-409.

[2] Chen S H, Zhang X, Bai J S. 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. (in Chinese)
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位标函数法 [J]. 高压物理学报, 2000, 14(4): 280-284.

[3] Osher S, Sethian J A. Front Propagating with Curvature-Dependent Speed; Algorithms Based on Hamilton-Jacobi Formulations [J]. J Comp Phys, 1988, 79: 12-49.

[4] Osher S, Fedkiw R. Level Set Methods and Dynamim Implicit Surface [M]. New York: Springer-Verlag New York Inc, 2003: 25-69.

[5] Peng D, Merriman B, Osher S, et al. A PDE-Based Fast Local Level Set Method [J]. J Comp Phys, 1999, 155: 410-43.

An Issue in the Numerical Simulation for Non-Ideal Detonation Propagation in Body-Fitted Coordinate Systems

ZHONG Min¹, CHEN Sen-Hua¹, LI Ping²

(1. *Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang 621900, China;*

2. *Laboratory for Shock Wave and Detonation Physics Research,
Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang 621900, China)*

Abstract: The Level Set method in body-fitted coordinate for propagation of non-ideal detonation is studied. According to the Hamilton-Jacobi formulation of the Godunov's scheme, we studied finite difference method for the propagation equation of non-ideal detonation in non-orthogonal body-fitted coordinate systems and presented an algorithm. We have shown a few calculations and compared with analytical and other numerical results.

Key words: non-ideal detonation; Level Set method; body-fitted coordinate

《高压物理学报》征稿简则

《高压物理学报》是我国高压物理领域唯一的专业性学术刊物,在国内外公开发刊。《高压物理学报》力求及时报道高压物理学科基础理论和应用研究方面具有创新性、高水平、有重要意义的研究成果,读者对象为国内外科技工作者。《高压物理学报》征稿内容为动态及静态高压技术,人工合成新材料,高温高压下材料的力学、光、电、磁等特性以及物质微观结构的研究,动态及静态高压研究中的测试技术,高温高压下的相变,高温高压物态方程等。《高压物理学报》接受中、英文稿件。

来稿应论点明确、数据可靠、逻辑严密、文字简练、图表清晰。每篇论文的篇幅应在 6 000~12 000 字以内,论文格式请参考近期出版的《高压物理学报》。请使用中华人民共和国法定计量单位。第一作者应确保全体作者同意文章署名,并提供第一作者、通讯作者简介(姓名、出生年、性别、职称、学位、研究方向等),以及所有联系方式(通信地址、邮政编码、电话号码、传真、电子邮箱等),以备联系。请注明论文(工作)的资助项目(资助项目名称和批准号),简要介绍工作背景和论文意义。来稿中所有图题、图注、表题、表注均为中、英文对照,图、表中的文字一律用英文。来稿一式三份。为缩短邮寄时间,编辑部建议作者使用电子邮件投稿(gaoya@caep.ac.cn 或 gywl@chinajournal.net.cn)。

自 1987 年创刊以来,《高压物理学报》取得了较大的成就。2001 年,《高压物理学报》被科技部和国家新闻出版总署评为“中国期刊方阵”双效期刊。国际主要检索系统“EI Compendex”和“CA”一直收录《高压物理学报》文章。由北京高校图书馆期刊工作研究会和北京大学图书馆编著的《中文核心期刊要目总览》连续四版把《高压物理学报》列为物理学类核心期刊(北京大学出版社,1992 年、1996 年、2000 年、2004 年)。

《高压物理学报》一贯秉承服务科学、服务读者、服务作者的办刊理念,慎重对待每一篇来稿,尊重作者劳动。优秀稿件享有快速发表通道,重大创新性成果可在 3 个月甚至更短时间内刊出。

重点注意事项

▲ 中英文摘要 中、英文摘要一定要仔细斟酌,英文摘要的质量直接决定文章能否被 EI Compendex 收录。摘要千万不要泛泛而谈,语言要简练,应有具体内容。要求:(1) 拥有与论文同等量的主要信息,应重点包括 4 个要素:即研究目的、方法、结果、结论等,结果、结论是最重要的。(2) 以提供论文梗概为目的,不得评论、解释论文内容。摘要叙述要完整,清楚,简明。《高压物理学报》要求中文摘要在 200~400 个字之间,英文摘要不少于 120 个实词。为便于 EI Compendex 以及国外其它数据库收录,英文摘要中尽量避免特殊字符(各种数学符号、上下脚标及希腊字母)及由特殊字符组成的数学表达式;第一句不要与英文题名重复;尽量用短句子并避免句形单调;用过去时态叙述主要工作,用现在时态叙述结论,尽量用主动语态代替被动语态。

▲ 参考文献 科技论文必须引用参考文献,《高压物理学报》要求作者应充分著录参考文献,并尽量引用近期国内外文献,采用“顺序编码制”著录。中文参考文献必须附英译文,著录项目应齐全。

▲ 版权与稿酬 《高压物理学报》已加入《中国学术期刊(光盘版)》、万方数据库、中文科技期刊数据库、中国期刊网、数字化科技期刊群、台湾中文电子期刊服务——思博网(CEPS)等。凡经本刊录用的稿件,作者便自动将光盘版和网络版出版权转让给《高压物理学报》编辑部,编辑部不再另行通知。来稿一经发表,即付稿酬(包括光盘版和网络版稿酬)。

来稿请寄:四川绵阳 919 信箱 110 分箱《高压物理学报》编辑部,邮政编码:621900

电子邮件:gaoya@caep.ac.cn; gywl@chinajournal.net.cn(投稿、征订、咨询)

电 话:(0816)2490042; 传真:(0816)2282695

《高压物理学报》编辑部