爆炸力学高精度数值模拟研究进展

王成^{①*}, SHU Chi-Wang^②

① 北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081;

② Division of Applied Mathematics, Brown University, Providence RI 02912, USA

* 联系人, E-mail: wangcheng@bit.edu.cn

2014-10-06 收稿, 2014-12-16 接受, 2015-03-16 网络版发表

国家自然科学基金(11325209, 11221202)和爆炸科学与技术国家重点实验室自主课题(ZDKT11-01)资助

摘要 爆炸问题的高精度数值模拟在武器弹药设计及毁伤评估、工业重大爆炸灾害等国防和民用问题中具有重要的理论价值和应⽤前景. 本文对近十几年来爆炸力学高精度计算的研究作了回顾与评述, 结合作者近年来的研究工作, 着重总结了高精度数值模拟保正性、高精度边界条件、自适应网格技术和多物质界面处理等方面的研究进展. 推广并发展了WENO格式和RKDG格式, 构造了守恒型高精度保正计算格式, 在复杂爆轰波问题的数值模拟中很好地解决了出现负密度和负压强的问题, 清晰地捕捉了爆轰波阵面结构和流动特征; 提出了基于笛卡尔网格的高精度Inverse Lax-Wendroff复杂边界处理方法, 该方法通过Inverse Lax-Wendroff获得一阶的法向偏导数值, 所有其他的高阶法向偏导数值由五阶WENO类型的外插方法获得, 实现了含复杂边界爆轰问题的高精度数值模拟, 并具有良好的稳定性和鲁棒性; 将后验误差估计方法应用于求解Euler方程中, 采用网格的后验误差作为细分的判据, 网格细分时在空间上利用高阶WENO插值, 时间上采用Hermite插值. 对于不需要细分的网格, 本文采用点对点的直接赋值方法进行合并; 发展了多介质界面处理的Local Level Set方法, 对计算域内速度场进行修正, 有效避免了速度场间断在求解界面位置时引起的误差; 将GFM(ghost fluid method)和RGFM(real ghost fluid method)界面处理方法相结合, 避免了GFM方法处理物质界面强间断时引入的虚假物理解, 克服了RGFM方法处理弱间断时, 重复求解Riemann问题引起的计算资源浪费. 最后, 对爆炸力学高精度计算的发展前沿进行了展望.

关键词

爆炸力学
高精度
数值模拟
多物质界面
并行计算

在武器弹药系统的设计、研制和工业重大爆炸灾害预防与救援的研究中, 涉及了大量的爆炸力学问题, 如弹药的爆炸与毁伤、矿井瓦斯爆炸、化工爆炸等. 由于爆炸力学是一个几何、材料和边界条件均为非线性的强耦合问题, 涉及高速、高压、高温、相变、气体、液体和固体等多种介质间相互耦合甚至混合, 材料不但会发生严重变形和破碎, 还会熔化甚至汽化, 使理论和实验研究遇到相当大的困难, 而计算机数值仿真试验技术具有安全保密、设计灵活、环境和过程可控、效费比高等优点, 是未来进行武器弹药研

制和爆炸灾害预防与救援的有效手段. 由于该类问题需要对多物质在爆炸载荷作用下的瞬态大变形计算以及高密度比和高压力比不同物质间大变形运动界面的精确模拟, 还涉及到材料在爆炸载荷作用下的动态本构及破碎、熔化和汽化等非线性力学行为的建模理论与高效数值方法, 这些都对高精度和高性能计算提出了超常规要求, 也是计算爆炸力学中前沿与挑战性问题, 同时也是计算数学和计算物理共有的重要研究内容, 被美国列入“先进模拟和计算学术战略联盟计划”(ASAP, 1997~2010)和“预测科学学

引用格式: 王成, Shu C W. 爆炸力学高精度数值模拟研究进展. 科学通报, 2015, 60: 882~898

Wang C, Shu C W. Progress in high-resolution numerical simulation of explosion mechanics (in Chinese). Chin Sci Bull, 2015, 60: 882~898, doi: 10.1360/N972014-00936

<https://engine.scichina.com/doi/10.1360/N972014-00936>

术联盟计划”(PSAAP, 2008~2013)。这些研究计划涉及到爆炸与冲击问题的高精度计算。

如何合理、比较精确地分析和分辨非定常、多物质、强间断流场一直是困扰爆炸力学工作者的重要问题。爆炸力学高精度数值模拟中常用的TVD格式可以达到二阶精度,但是在流场的某些流动变化较大的区域就会自动降为一阶,不能满足高阶精度要求。为了克服TVD格式的弱点,出现了ENO(essentially non-oscillatory)格式^[1]。ENO格式放宽了对数值解总变差不能增长的限制,允许总变差微小增加,并使格式达到一致高阶精度且本质无振荡。在九十年代,Liu等人^[2]在ENO格式构造思想的基础上提出了三阶精度加权本质无振荡有限体积形式WENO(weighted essentially non-oscillatory)格式,Jiang等人^[3]则提出五阶及更高阶精度的有限差分WENO格式,该格式继承了ENO有限差分格式的优点,此外,该格式优化了加权因子的计算、改进了光滑指示器,使格式的精度在光滑区得到了进一步的提高。国内张涵信等人^[4,5]通过小扰动分析的方法研究了色散误差对改善激波附近数值解行为的作用,构造了无波动、无自由参数的耗散差分格式,在科学与工程领域得到了很好的应用;沈孟育等人^[6]将WENO格式和FCT格式结合起来,更为有效地抑制过激波间断的非物理解振荡,并且在多维问题计算中无须做特征变换;任玉新等人^[7]以三次样条逼近为基础,提出了一种求解流体力学双曲型守恒律的高精度、无波动的有限体积方法,数值模拟结果表明该方法对激波和接触间断有很高的分辨率;宗文刚等人^[8]研究了一种双重加权实质无波动激波捕捉格式,通过典型算例的计算结果显示了该格式与传统WENO格式相比具有较高的间断分辨率;朱君等人^[9]构造了一种多重加权实质无波动激波捕捉格式MWENO(multi-weighted essentially non-oscillatory),与传统WENO格式相比具有较高的间断分辨率。本文仅针对与爆炸力学紧密相关的高精度计算格式进行了简要回顾,实际上在计算数学和计算流体力学中还有若干好的计算格式,但由于篇幅的限制,这里不再逐一陈述。以下结合作者近年来的研究工作,综述十几年来爆炸力学高精度数值模拟的研究进展。

1 高精度保正性数值计算方法

高精度的RKDG(Runge-Kutta discontinuous Ga-

lerkin), WENO有限体积和WENO有限差分这些高阶格式已在许多领域的数值模拟中得到广泛应用,然而在爆炸力学的数值模拟中它们依然不够完善,在某些极端情况下可能仍不稳定。比如爆轰波在复杂空间传播的数值模拟中,由于爆轰波的绕射,会产生稀疏区域,该区域内的密度和压强非常小(接近零),这些高精度格式的数值解中就有可能产生负密度和压强,这一现象不仅与实际物理过程不符,而且导致了计算终止。为了避免负密度和压强的出现,传统的解决方法是直接将这个负数置为零或正数,这样做虽然可以使得计算能够继续进行,但是破坏了整体的守恒性,因而也就降低了计算结果的准确度和可信度。

关于低阶格式的保正性研究已在文献[10,11]中由Einfeldt和Linde等给出,但是低阶格式的收敛速度较慢,为得到较高的精度需要庞大的计算量。保正性的研究工作重点是以高精度格式为主,一些高精度的算法在爆轰中的应用研究已经展开^[12,13],很多在双曲守恒律方程中成功的高精度数值格式^[14,15],均无法满足严格的高精度保正性。如何构造一个不破坏守恒性,并且具有很好稳定性的高精度保正格式成为复杂区域内爆轰波数值模拟面临的一个难题,并且在很长时间以来一直没有得到很好地解决。

近几年来,关于保正性的研究已经取得了较大的进展。Zhang等人^[16,17]提出了高阶RKDG保正格式,该方法构造了一个保正限制器,并将其与TVB限制器相结合得到了不破坏守恒性和稳定性,并保持高精度的保正格式。该方法首先证明了当时间步长满足一定条件时,可以保证单元格内的均值为正,然后利用均值构造保正限制器,使得数值模拟中密度和压强保持非负。Zhang等人^[18]将该思想应用到有限体积格式上,构造了高精度WENO有限体积法的保正格式。2012年Zhang等人^[19]进一步研究了二维高精度WENO有限差分的保正格式,该格式利用了有限差分与有限体积二者的关系,构造出了WENO有限差分的保正格式。Cheng等人^[20]将上述方法推广到拉格朗日方法中,用于解决多物质可压缩流的问题,针对不同的状态方程构造了统一的保正限制器。

近年来,作者在爆轰波高精度数值模拟的保正格式方面也取得了一系列成果。首先在高精度RKDG的保正格式的研究上取得了进一步的进展。文献[16,17]中的高阶RKDG保正格式仍需要通过TVB限

制器来消除间断点处的振荡, 作者对保正格式进行了改进^[21], 构造了新的RKDG保正格式, 使得计算中不再需要TVB限制, 简化了计算, 提高了效率. 大量的数值模拟结果表明, 该RKDG保正格式具有很好的鲁棒性和稳定性. 将此格式应用于爆轰波的数值模拟中, 很好地解决了爆轰波数值模拟中出现负密度和压强的问题.

图1给出了用高精度RKDG保正格式计算Sod问题和Lax问题所得密度曲线与精确解的比较(实线表示精确解), 从图中可以看出该格式可以很好地处理间断问题^[21].

图2和3(a)~(f)分别给出了点源爆炸以及爆轰波

绕射不同角度时的密度和压强云图, 这几种情况都是十分典型会出现低密度和压强的问题, 如果仅用TVB限制器的RKDG格式计算, 均会由于负密度和压强的产生而中止, 而采用高精度RKDG保正格式则可模拟出较为理想的数值结果.

其次, 作者将高精度RKDG保正格式推广到带有两步化学反应的欧拉方程组, 给出了完整的理论推导, 并模拟了爆轰波在更复杂管道中的传播, 从而可以更系统地分析爆轰波的传播机理. 图3(g), (h)和图4是用RKDG保正格式求解两步化学反应的欧拉方程的数值结果, 图3(g), (h)是模拟爆轰波绕射150°角的密度和压强云图, 图4是模拟爆轰波在圆形管道中

图1 (网络版彩图)密度曲线^[21]. (a) Sod 问题; (b) Lax 问题

Figure 1 (Color online) Density curves^[21]. (a) Sod problem; (b) Lax problem

图2 (网络版彩图)收敛性验证的密度云图和压强云图^[21]. (a) 密度; (b) 压强

Figure 2 (Color online) The colored contour of convergence study^[21]. (a) Density; (b) pressure

图3 (网络版彩图) 爆轰波绕射 n° 角的密度和压强云图. (a)^[21], (c)^[21], (e)^[21], (g) 分别为 $n^\circ = 90^\circ, 120^\circ, 135^\circ, 150^\circ$ 的密度云图; (b)^[21], (d)^[21], (f)^[21], (h) 分别为 $n^\circ = 90^\circ, 120^\circ, 135^\circ, 150^\circ$ 的压强云图

Figure 3 (Color online) Detonation diffraction at n degrees corner. (a)^[21], (c)^[21], (e)^[21], (g) Density: $n = 90, 120, 135, 150$, respectively; (b)^[21], (d)^[21], (f)^[21], (h) pressure: $n = 90, 120, 135, 150$, respectively

图4 (网络版彩图)爆轰波在圆形管道传播. (a) 密度; (b) 压强

Figure 4 (Color online) Detonation propagation in a circular pipe. (a) Density; (b) pressure

形成旋转爆轰而自持传播的密度和压强云图。

爆轰实质上是三维现象,许多重要的结构特征不能从二维模拟得到,比如“拍波”,螺旋结构等。但是三维爆轰数值模拟对网格与算法精度要求很高,如果网格节点数不满足精度要求时,不能很好地捕捉爆轰波的阵面结构和流动特征,而且所得爆轰波的传播规律并不能反映真实的物理规律^[22]。同时,三维爆轰波要形成自持爆轰需要较长的计算时间和足够的管道长度。在三维爆轰数值模拟中,计算时间和网格节点数占有非常庞大的资源,远远超过单CPU计算能力。因此开展大规模并行计算对于三维爆轰数值研究尤为重要。由于三维爆轰计算涉及复杂的物理模型,计算中更容易出现密度、压强等物理量为负而导致程序终止的情况,因此需要进行三维高精度保正性计算格式的研究。

在二维高精度WENO有限差分的保正格式^[19]的基础上,我们将其推广到三维,并将其与高性能并行计算相结合,开发了三维爆轰有限差分高精度动态并行程序,模拟了爆轰波在有障碍的大尺寸管道中的传播^[23],图5给出了模拟三维爆轰绕射90°角和135°角的密度和压强云图。

图6和7分别给出了模拟三维爆轰经过两个障碍物后的传播过程及壁面最大压强历程。从图6中可以看出,爆轰波由障碍物孔喷出,波阵面呈现球面特征,由于障碍物阻挡了部分能量,波阵面压力较低。而后波阵面与壁面碰撞,发生反射,在各个壁面形成横波,横波不断发展,与管道角落碰撞,发生爆炸,点燃未燃气体,推动局部爆轰波阵面迅速向前传播,追赶上前段的球形阵面。各个壁面反射后形成的相

互平行的三波线,相向运动。三波线汇聚于轴线,发生碰撞。随着时间的推移,由于三维爆轰波的不稳定性导致三波线分裂,于是壁面上三波点的个数增加,而且阵面上三波线变得不规则。图7显示了爆轰波经过障碍物后壁面上最大压力历程。可以看出,爆轰波经过障碍物,开始时在壁面出现“拍波”,这与文献^[24]描述的现象一致,而且“拍波”同步,进一步说明这一阶段爆轰为同步矩形模式。随着时间推移,壁面上的“拍波”消失,而且渐渐演化成不规则的胞格结构,这是由于三维爆轰不稳定性所造成的。

通过高精度三维保正格式在爆轰模拟中的应用,清晰地捕捉了爆轰波阵面结构和流动特征,进而更加真实的反映了爆轰波的传播机理,对探索三维爆轰波新的传播机理和阵面反应机制具有十分重要的意义。

2 边界处理的高精度数值计算方法

对于高维问题,基于笛卡尔网格的有限差分型数值方法简单且容易实现。但是,对于含复杂边界的问题,由于复杂边界和网格线是任意相交的,这样必然导致网格点只有极少一部分落在物理边界上,从而导致在边界附近数值精度的降低,甚至会导致数值格式不稳定,从而出现程序无法计算下去的情况,因此,发展可以充分利用复杂边界的物理信息且具有高精度和较好稳定性的数值方法是非常必要的。

由于在边界附近可能含有强间断现象,双曲型方程含复杂边界的高精度数值处理方法往往比椭圆型或对流扩散方程更加复杂。当激波从边界处反射时,边界的数值处理应该具有很好的鲁棒性和稳定

图5 (网络版彩图) 爆轰波绕射 n° 角的密度和压强云图^[23]. (a), (c) 分别为 $n^\circ = 90^\circ, 135^\circ$ 的密度云图; (b), (d) 分别为 $n^\circ = 90^\circ, 135^\circ$ 的压强云图
Figure 5 (Color online) Detonation diffraction at n degrees corner^[23]. (a), (c) Density: $n = 90, 135$, respectively; (b), (d) pressure: $n = 90, 135$, respectively

图6 (网络版彩图) 爆轰波传播经过两个障碍物^[23]
Figure 6 (Color online) Propagation of detonation wave in case of two obstacles^[23]

性。目前, 对称反射技术是一种比较受欢迎的方法, 能够有效地利用在固壁边界处的已知边界条件求解可压缩的流动问题。当固壁边界是直线型的且被放置在笛卡尔坐标系下矩形网格线的对称位置时, 对

称反射技术是一种简单有效的方法。但是, 对于曲线或曲面的复杂几何边界, 该方法的精度是难以保证的^[25], 一般不会超过一阶精度。嵌入边界方法首先被Peskin^[26]提出用于研究生物流体力学问题, 该方

图7 (网络版彩图)壁上最大压强历程^[23]

Figure 7 (Color online) Maximum pressure history on the walls^[23]

法不仅利用了规则的笛卡尔网格而且极大地简化了过去繁琐的网格生成任务. 该方法的主要思想是通过在动量方程中引入一些强迫项使得边界效应能够在附近的流场中得到合理的表现. 对于基于有限差分格式的嵌入边界方法, 必须在边界处构造几个虚拟点, 这样才能获得高精度的内部数值格式. Farooq等人^[27]提出了基于笛卡尔网格的简化和修正简化虚拟点处理方法来处理高维可压缩的欧拉方程. 对于内部节点采用二阶精度的数值格式, 该方法在边界附近是具有二阶精度的. 基于有限差分格式, 文献[28]提出了二阶精度的边界处理方法, 用于求解带Dirichlet或Neumann边界条件的一维波动方程. 文献[29]提出了含复杂边界高维可压缩欧拉方程的具有二阶精度的嵌入边界有限差分处理方法, 利用外插方法得到虚拟点的值, 采用了限制器防止激波附近的数值震荡, 但是, 该方法仅需计算域外的一个虚拟点, 推广这样的方法到高精度的可行性和有效性有待进一步验证. Appelo等人^[30]发展了基于紧致差分格式的可以达到四阶精度的嵌入边界处理方法用于求解带Dirichlet或Neumann边界条件的波动方程. Huang等人^[31]为了利用3阶精度的有限差分方法求解静态的Hamilton-Jacobi方程, 提出了一种Lax-Wendroff类型的入流边界处理方法, 避免了对入流信息不恰当地处理导致整体精度的降低. 文献[32]利用了Lax-Wendroff类型的入流边界处理方法, 实现了整体五阶精度求解静态Hamilton-Jacobi方程. Goldberg等人^[33]分析了一维线性的双曲型方程的一类数值边界条件. Tan等人^[34]对该方法进行推广并系统化, 使该方法能够用于求解任意区域的高维非线性问题, 这样的物理边界与笛卡尔网格可以以任意方式相交, 该方法称为ILW(Inverse Lax-Wendroff)方法, 其主要思想是: 对于入流边界, 反复利用偏微分方程, 把法

向偏导数用已知的边界条件关于时间偏导数和切向偏导数来表示, 利用这些已知的法向偏导数, 根据泰勒展开式很容易获得边界附近虚拟点的逼近值; 对于出流边界条件, 如果边界附近不含间断, 可以采用拉格朗日外插或者最小二乘法外插的方法得到虚拟点的值, 如果在边界附近存在间断, 则采用三阶精度的WENO类型的外插获得虚拟点的值. 该方法理论上是可以实现任意阶精度的边界处理方法, 但是, 由于该方法需要反复利用偏微分方程, 使得其在实际应用中很难获得超过三阶精度. Filbet等人^[35]把该方法进一步推广到了BGK和ES-BGK等数学模型. 这类问题的边界条件对解的渐近行为有着重要的影响, 尤其对于低速的流动问题, DSMC方法是不稳定的, 主要原因在于入流条件不再是已知的函数, 而是由出流来决定的, 将ILW方法推广到这类问题不仅获得了较高的精度而且具有很好的稳定性. 作者进一步发展和简化了ILW方法^[36], 经过大量的数值研究表明, 在泰勒展开式中, 只有前两项, 也即常数项和法向一阶偏导数项对于确保ILW方法的稳定性是至关重要的. 也就是说, 在入流边界附近相对复杂的ILW方法仅用于法向一阶偏导数, 对于其他所有高于一阶的法向偏导数, 不再考虑边界处的出流和入流方向, 只需利用五阶精度的WENO类型的外插方法求得. 该简化实现了ILW方法在二维流动问题中处理复杂边界时能够达到五阶精度. 对于这类简化的ILW方法, Vilar等人^[37]分析了一般的复杂物理边界与笛卡尔网格以任意方式相交情况的稳定性. 我们利用改进的ILW方法, 基于带化学反应的控制方程, 实现了对爆轰问题的高精度数值模拟. 对含复杂的固壁边界问题, 考虑了曲边界的曲率半径, 使得在用ILW方法过程中不再出现切向偏导数, 简化了繁杂的数学推导过程, 极大地方便了程序的实现, 使得计算域内与边界处达到了一致五阶精度, 在一定程度上能够更加客观地反映爆轰波与固壁边界相互作用的复杂机制, 同时, 数值格式具有很好的稳定性和鲁棒性. 爆轰波从左向右传播, 与复杂边界相互作用的不同时刻的数值模拟结果如图8所示.

3 自适应网格方法

传统的计算方法由于对网格步长和时间步长的要求较高, 在计算过程中需要耗费大量的计算资源, 且计算周期过长. 特别对于大模型、高维爆轰问题的

图8 (网络版彩图)爆轰波与复杂边界相互作用不同时刻的压力分布. (a) $t = 1.65 \mu\text{s}$; (b) $t = 2.05 \mu\text{s}$

Figure 8 (Color online) Pressure contour of the interaction of detonation wave with complex boundary at different time. (a) $t = 1.65 \mu\text{s}$; (b) $t = 2.05 \mu\text{s}$

研究,传统数值方法有很大的限制.自适应网格方法可以根据物理问题特征,通过调整或改变网格的形状、大小、疏密程度,不仅能够提高数值结果的精度及分辨率,同时能够有效地减少计算资源的消耗.自适应网格方法多种多样,对于不同的数值计算方法,通用的网格自适应方法可以大致分为3类:自适应网格加密AMR(adaptive mesh refinement),移动网格方法(moving mesh method),网格重构方法(adaptive mesh redistribution)等^[38].

有限差分方法由于实现简单、计算量相对较小以及精度可选等优点,是爆轰波数值研究中的重要方法之一.由于有限差分方法对网格要求较高,很多差分方法要求网格一致、均匀,而移动网格法与网格重构方法需要改变网格的形状、大小,将有限差分方法与移动网格法和网格重构法结合较为困难.目前,基于有限差分的自适应网格方法多采用自适应网格加密方法(AMR).

3.1 基于有限差分法的AMR研究进展

20世纪80年代, Berger等人^[39]最早提出基于有限差分的AMR方法.该方法通过将计算域内局部区域的网格进行加密,能够将计算资源合理地分配到计算域内.特别对于尺度跨度较大的物理问题,该方法能够极大地提高计算效率,很快被推广到计算流体力学,天体物理学等领域^[40,41].

目前,仍有很多学者致力于AMR算法的完善和改进.早期Berger等人利用基于块的数据结构组织和处理加密网格.这种方法在基网格的基础上,通过多级加密,得到一系列不同层级的网格.对于同一层级的网格,通过集群算法,构造一个规则的逻辑计算域,不同层级的逻辑计算域组成了树状的数据结构.这种数据组织方法对于不同的数值算法有很好的适

用性,不需要对数值算法进行较大改动.但是这种数据组织方法将许多不需要细分的网格也进行细分,在一定程度上降低了AMR算法的效率.为此, Khokhlov等人^[42]提出了一种基于单元的数据结构.这种方法采用了fully threaded tree (FTT)数据结构.在FTT数据结构中,每个节点是由一个网格单元信息和指针信息组成的逻辑体.指针用于指向网格单元的父单元和子单元.网格单元信息包括单元的层级、位置等相关信息.这种数据结构在使用相邻网格信息时不需要附加的搜索操作.但是由于网格单元相互关联,很难实现网格的并行化. Ji等人^[43]在FTT数据结构的基础上,提出了一种新的基于单元的数据结构.数据结构中加入了类似笛卡尔坐标的指示器来确定网格位置,通过对网格进行编号,建立了类似笛卡尔坐标的指示器与网格单元的散列表.这种方法很好地克服了FTT数据结构难以并行化的缺点.

随着近年来并行计算技术的迅猛发展,越来越多的学者将注意力集中于AMR方法的并行化.并行的AMR方法能够在并行计算的基础上进一步提高计算效率.特别对于一些大规模,超大规模的并行数值计算,AMR方法与并行方法的结合,能够大幅度地降低计算资源的消耗,减少计算周期.早期的对AMR的并行化的研究主要基于共享内存的粗颗粒MIMD模型.如Berger等人^[44]利用数据并行模式实现了AMR方法的并行. Colella等人^[45]则在并行时采用了任务队列模式.目前的计算机多采用分布式存储架构,近年来,越来越多的学者开始研究基于分布式存储的并行AMR算法.对于AMR方法,由于计算域内的网格数量随时间不断变化,在并行过程中如何将网格平均的分配到各个处理器上,使处理器达到负载均衡成为基于分布式内存的并行AMR方法的研究热点.目前有许多方法被用于平衡工作负载,如space-

filling curves, bin-packing, spatial-bisection等^[46-48].

在过去的30年中,随着人们对微分方程数值方法研究地深入,高精度数值方法的设计和应用研究非常活跃.但是高精度数值方法会增加计算量及存储量.将AMR方法与高精度数值格式结合,能够一定程度上减小计算消耗.目前,越来越多的学者致力于研究基于高精度格式的AMR方法.Teyssier等人^[49,50]在高阶Godunov格式的基础上设计了AMR算法.Baeza等人^[51],Shen等人^[52],Dumbser等人^[53]分别设计了基于高精度WENO格式的AMR方法.

3.2 AMR在爆轰波模拟中的应用

随着AMR方法的发展及不断完善,越来越多的学者将AMR方法用于求解爆轰问题.

Valorani等人^[54]基于Berger等人提出的AMR方法,对方法进行了改进,将AMR方法推广应用到爆轰问题的数值模拟中.通过与一致网格的计算结果进行对比,发现在一维爆轰波数值模拟中,AMR方法能够在损失精度很小的情况下大幅度地缩短计算周期,减小内存资源的消耗.之后,Valorani等人^[55]将AMR方法推广到求解二维平面爆轰问题中,对不同分辨率网格的连接处出现的数值扰动进行分析,通过改进AMR方法中的细分判据,使AMR方法能够更好的用于二维平面爆轰的数值模拟.Quirk^[56]将AMR方法与并行计算结合,实现了AMR方法的并行化,利用并行AMR方法,研究了斜爆轰波的马赫反射.

Sharpe等人^[57]利用基于二阶Godunov数值格式的AMR算法研究了二维空间中爆轰波的传播、胞格的演化规律,对不同网格分辨率下的计算结果分析发现,只有网格分辨率达到50或更高,爆轰波结构中的一些非线性结构才能够被准确地捕捉到.

Loth等人^[58]将AMR方法推广应用于非结构网格的有限元方法中.利用基于FTC(flux corrected transport)有限元的AMR方法模拟二维爆轰问题,验证了基于有限元的AMR方法在求解爆轰问题中的可行性.

Deiterding^[59]将Berger等人提出的AMR方法推广到三维,将方法并行化,开发了并行AMR程序.但是在并行方法的设计中,由于使用了严格的区域分解方法,造成了各处理器负载分布不均匀.利用并行AMR程序模拟了氢气氧气混合系统爆轰中强横波结构和弱横波结构.之后在文献^[60]中利用开发的程序

研究了三维爆轰波的胞格结构以及爆轰波衍射.Ravindran等人^[61]利用Berger等人的方法模拟了二维爆轰波的传播.

作者提出了一种基于高精度WENO差分格式的AMR方法,该方法采用后验误差估计作为网格的细分判据^[62],后验误差估计是基于模型方程推导得出的一种数学判据,该判据与物理判据相比具有更高的通用性.基于块数据结构的AMR算法需要引入复杂集群算法用来生成细分数据块,而且在细分数据块中会出现许多本不需要细分的网格单元,这在一定程度上造成了计算资源的浪费,也降低了AMR的效率.为此,作者采用基于单元的数据结构组织数据,基于单元的数据结构不需要集群算法,而且不会出现不必要的细分.特别对有复杂边界的问题,基于单元的数据结构具有很大的灵活性.为了能够保证时间和空间上的高精度,利用WENO插值和Hermite插值方法实现粗网格到细网格的数据延拓.基于message passing interface(MPI)并行方法,将该方法并行化,用于求解了大规模爆轰问题.基于以上方法,研发了并行高精度AMR计算程序,并将该程序用于双马赫反射(图9)、强横波作用下的二维爆轰波结构(图10)以及三维气相爆轰问题(图11)等一系列激波问题和爆轰问题的数值模拟.

4 多物质界面处理

爆炸力学计算按其采用Lagrange坐标系还是Euler坐标系,分为Lagrange方法和Euler方法2大类.Lagrange方法能够清晰显示解域内部多种物质的内界面和自由界面,但当材料发生大变形时,拉氏网格发生扭曲,甚至相邻网格彼此相交和重叠,使计算无法进行下去.Euler方法能够计算具有任意大变形的物质流动问题,当系统中含有多种物质的时候,如何确定物质界面的位置,如何计算混合格格的力学量,以及如何计算混合格格通过边界的输运量,一直是Euler程序所面临解决的问题.对于多物质界面追踪,目前主要有如下4大类方法:格子质点类方法、VOF方法、Level Set方法和Front Tracking方法.

4.1 格子质点类方法

格子质点类方法中有代表性的方法包括PIC方法^[63]、FLIC方法^[64]、MAC方法^[65].该类方法本质上是Lagrange-Euler混合方法,通过把连续的流场看成

图9 (网络版彩图)双马赫反射密度等值线图. (a) AMR 计算结果; (b) 均匀网格计算结果

Figure 9 (Color online) Density contour of double mach reflection. (a) Numerical result of AMR; (b) numerical result of uniform mesh

图10 强横波作用下爆轰波结构. (a) AMR 计算结果; (b) 均匀网格计算结果

Figure 10 Detonation structure of strong transverse waves. (a) Numerical result of AMR; (b) numerical result of uniform mesh

图11 三维爆轰波网格划分

Figure 11 Mesh for three dimension detonation wave

是分布在Euler网格内具有Lagrange特征的有限个质点的质点系,通过在格子内设置多个跟踪点,对这些跟踪点进行计算、追踪实现多物质界面的处理.后来该方法得到不断地完善和发展,相继提出了SMAC^[66]和GENSMAC^[67]方法.但是,该类方法能给出界面的粗糙近似,但不能给出界面更加细致的描述,如界面斜率和曲率等,而这些是爆轰研究中非常关心的参数.更主要的问题是格子质点类方法存储量大,特别是对于三维问题更加突出.基于PIC方法,Sulsky 等人^[68]提出MPM(material point method)数值方法.张雄等人^[69,70]对MPM法在爆炸与冲击问题中的应用进行了系统深入的研究,并开发了相应的MPM3D计算程序.

4.2 VOF方法

1981年, Hirt等人^[71]提出了VOF方法, 对于运动界面追踪问题的数值模拟做出了开创性的贡献. 比较有代表性的VOF方法有SLIC(simple line interface calculation)方法^[72]、Youngs界面重构方法^[73]和FLAIR界面重构方法^[74]等. 在混合网格中含有两种物质的情况下, 上述几种方法都适用. 从周围信息利用程度来讲, Youngs界面处理方法较高, 并能够较好地应用到爆炸与冲击问题的模拟^[75,76]. 对于3种及以上物质情况, SLIC方法的思想较为简单, 易于实现, 逻辑简单, 实用性较强, 可以推广到多物质情况. 近年来, 一些学者提出了采用二次曲线近似界面^[77], 以及基于体积份额和质量中心点的坐标确定物质界面的MOF方法^[78], 提高了界面重构的精度, 并在冲击问题中得到了应用^[79,80].

宁建国等人针对爆炸与冲击问题三维大规模数值模拟的工程需求, 深入开展了多物质流体弹塑性欧拉数值方法的研究, 提出了三维模糊界面算法^[81], 并发展了适用于冲击波强间断计算的伪弧长算法^[82], 提高了间断处的分辨率, 开发了三维欧拉型爆炸与冲击问题大规模并行计算软件EXPLOSION-3D^[83]、三维有限差分网格自动生成软件MESH-3D^[84]和三维爆炸场数据分析及特征提取可视化软件VISC-3D.

4.3 Level Set方法

1988年, Osher等人^[85]提出了Level Set方法, 其原理就是用Level Set函数的零等值面来描述多物质界面, 可以方便地处理复杂物质界面及界面合并、交叉和破碎等拓扑结构发生较大变化的情形, 易于推广到高维问题, 非常适合于模拟爆炸与冲击问题. 为了修正捕捉到的界面, Enright在界面附近一定宽度的区域每个网格单元内布置无质量的跟踪点用来修正Level Set函数捕捉到的界面, 即Particle Level Set^[86]. 针对多物质界面两侧物理量计算问题, Fedkiw等人^[87]提出了GFM方法, 使得多物质相互作用问题的数值模拟有了很大进步, 但在解决如爆炸强间断问题时该方法会引起虚假的物理理解, Liu等人^[88,89]提出了MGFM方法, 在界面处构造Riemann问题, 对虚拟流体的状态进行了修正, 应用该方法对水下爆炸及冲击波与结构的相互作用等进行了数值模拟, 提高了强间断处理的计算精度. Wang等人^[90]提出了

RGFM方法, 该方法用Riemann问题的解修正紧临界面真实流体的状态, 并采用Riemann问题的解对虚拟流体的状态也进行修正, 并结合Level Set方法模拟水下冲击波与气泡相互作用问题, 减少了守恒误差, 提高了算法的稳定性. Qiu等人^[91,92]应用RKDG方法结合GFM和MGFM方法对气-气和气-液等多物质相互作用问题进行了数值模拟研究. Kim等人^[93]采用particle level-set对多物质界面进行追踪, 对高能炸药在铜管中的爆炸进行了模拟研究. Tran等人^[94]提出了一种模拟多物质冲击问题的欧拉数值方法, 采用欧拉型守恒律控制方程描述物质的变形, 并用高精度ENO格式求解控制方程, 用Particle Level Set方法追踪物质界面. 刘凯欣等人^[95-98]基于拉格朗日粒子捕捉界面位置, 通过Level Set函数将粒子捕捉的界面信息映射到欧拉网格中, 开发出了SUPER CE/SE计算软件, 该软件可以模拟高速碰撞、聚能射流和爆炸焊接等爆炸与冲击问题.

近年来, 作者针对爆炸冲击波阵面的强间断特性, 发展了Local Level Set界面追踪方法, 对计算域内速度场进行修正, 有效避免了速度场间断在求解界面位置时引起的误差, 将GFM和RGFM界面处理方法相结合, 从根本上避免了GFM方法处理物质界面强间断时引入的虚假物理解, 克服了RGFM方法处理弱间断时, 重复求解Riemann问题引起的计算资源浪费. 结合高精度保正性计算格式, 研发出了爆炸问题的高精度计算程序, 实现了空中爆炸、水下爆炸等一系列爆炸问题的数值模拟^[99,100]. 图12给出了采用商用软件和作者的界面处理方法对空中爆炸的计算结果, 从图中可以看到, 采用我们的界面处理方法能够更好地跟踪界面, 并能保持更好的对称性.

图12 (网络版彩图)空中爆炸. (a) AUTODYN 计算结果; (b) 作者的计算结果

Figure 12 (Color online) Air explosion. (a) AUTODYN's result; (b) our numerical result

4.4 Front Tracking方法

Front Tracking方法^[101,102]能够保持间断的准确和锐利,该方法把间断作为移动的内边界来处理,因而必然会用到非正规网格,当网格变得很小时不可避免地引起CFL条件难以满足的“小网格”问题,给数值计算造成不稳定,而且由于该方法要处理界面拓扑结构的变化,当推广到多维问题时,交界面的重构变得非常复杂.由于该方法在间断处对流体状态变量进行单侧光滑外推,采用不同的数值通量进行计算,因而不可避免地引入守恒型误差.为了克服上述不足,网格合并和细化、重分等处理方法不断地被提出来.Glimm等人^[103,104]自二十世纪八十年代以来对该类方法不断的进行完善和发展,许多有价值的方法被提出来并发表了很多有指导意义文章并形成比较实用的FronTier软件,解决了许多实际问题.Tryggvason等人^[105,106]也提出了新颖的间断跟踪方法.Mao^[107,108]运用解的守恒性提出了一种二维的守恒型Front Tracking方法,若干算例表明该算法守恒、简洁且高效.基于Front Tracking方法的思想,温万治^[109]和作者^[110]提出并发展了一种网格线示踪点法,对每一种物质用一串首尾相接的线段链来逼近物质表面曲线,且每条线段的端点(即示踪点)均定义在网格线上,根据网格中示踪线的位置来计算网格间材料的输运量,将该方法应用于聚能射流形成的模拟,如图13.

5 总结与展望

本文对近十几年来爆炸力学高精度计算的研究作了回顾与评述,结合作者近几年在这一领域的研

究工作,着重总结了高精度数值模拟的守恒型保正格式、高精度边界条件、自适应网格技术和多物质边界处理等方面国内外的研究进展.

高精度数值格式如RKDG、WENO有限差分、WENO有限体积等方法虽然已得到广泛的应用,但是在爆轰的数值模拟中会出现密度、压强等物理量为负的情况,这不仅与实际物理过程不符,而且会导致程序计算终止.为此,在高精度数值格式的基础上,提出了守恒的、稳定的高精度保正计算格式,并在气相爆轰中得到了很好地应用,但是该方法推广应用得多相爆轰、复杂几何构型和多步化学反应模型等还有待进一步深入的研究.

基于笛卡尔网格的高精度ILW复杂边界处理方法,在含复杂边界二维爆轰问题的数值模拟中得到了很好地应用.但是,对于三维的爆轰问题,由于ILW方法向高阶精度推广的数学推导过程复杂,因此构建高维问题的复杂边界的高精度处理方法还有待解决.同时,在高维问题中,高精度WENO类型的插值方法需要选用大量的节点值,并且需要多次求解大型线性方程组,极大地增加了应用复杂边界方法的计算量,需要进一步研究.

AMR方法已经广泛的用于各个学科领域,并且日趋完善.但是随着并行技术的发展以及高精度数值格式的广泛应用,又为AMR方法提出了新的课题.如何实现高精度的AMR方法以及负载均衡的AMR并行方法等问题依然有待研究.目前,AMR方法在爆轰数值研究中的应用较少且大多基于低阶格式.随着爆轰研究的日益发展,对计算精度提出了更高的要求,高精度的AMR方法变得越来越重要.在解决大

图13 (网络版彩图)钢药型罩聚能射流形成过程. (a) $t = 0 \mu\text{s}$; (b) $t = 22.1 \mu\text{s}$; (c) $t = 50.2 \mu\text{s}$; (d) $t = 56.5 \mu\text{s}$

Figure 13 (Color online) Jet formation process of shaped charge of steel liner. (a) $t = 0 \mu\text{s}$; (b) $t = 22.1 \mu\text{s}$; (c) $t = 50.2 \mu\text{s}$; (d) $t = 56.5 \mu\text{s}$

模型爆轰问题时,还需要将并行技术与AMR结合,提出更高效的并行AMR算法。

在多物质数值模拟的基础上,针对爆炸力学问题的特性,提出了爆炸力学的高精度数值模拟方法,并针对一些典型的爆炸力学问题进行了数值模拟研究。由于爆炸载荷下气体、液体和固体多物质强相互

作用的非线性力学行为的复杂性,在高精度计算时,有待于对高密度和高压力比、一般状态方程下多物质相互作用机理进行深入研究,需要进一步完善可用于工程计算的、置信度较高的动态本构关系和状态方程,以及可满足典型爆炸力学问题仿真需求的材料模型库及数据库。

参考文献

- Harten A, Osher S. Uniformly high order accurate nonoscillatory schemes I. *SIAM J Numer Anal*, 1987, 24: 279–309
- Liu X D, Osher S, Tony C. Weighted essentially non-oscillatory schemes. *J Comput Phys*, 1994, 115: 200–212
- Jiang G S, Shu C W. Efficient implementation of weighted ENO schemes. *J Comput Phys*, 1996, 126: 202–228
- Zhang H X. The exploration of the spatial oscillations in finite difference solutions for navier-stokes shocks (in Chinese). *Acta Aerodyn Sin*, 1984, 1: 12–19 [张涵信. 差分计算中激波上、下游出现波动的探讨. *空气动力学学报*, 1984, 1: 12–19]
- Zhang H X. Non-oscillatory dissipation and non-free-parameter difference scheme (in Chinese). *Acta Aerodyn Sin*, 1988, 6: 143–165 [张涵信. 无波动、无自由参数的耗散差分格式. *空气动力学学报*, 1988, 6: 143–165]
- Shen M Y, Li H D, Liu Q S. Analytic discrete WENO-FCTscheme (in Chinese). *Acta Aerodyn Sin*, 1998, 16: 56–63 [沈孟育, 李海东, 刘秋生. 用解析离散法构造WENO-FCT格式. *空气动力学学报*, 1998, 16: 56–63]
- Ren Y X, Liu Q S, Wang S P, et al. A high order accurate non-oscillating finite volume scheme using spline interpolation for solving hyperbolic conservation laws (in Chinese). *Acta Aerodyn Sin*, 1996, 14: 281–287 [任玉新, 刘秋生, 王少平, 等. 求解双曲型守恒律的高精度、无波动样条逼近有限体积方法. *空气动力学学报*, 1996, 14: 281–287]
- Zong W G, Deng X G, Zhang H X. Double weighted essentially non-oscillatory shock-capturing schemes (in Chinese). *Acta Aerodyn Sin*, 2003, 21: 218–224 [宗文刚, 邓小刚, 张涵信. 双重加权实质无波动激波捕捉格式. *空气动力学学报*, 2003, 21: 218–224]
- Zhu J, Zhao N. A kind of MWENO scheme and its applications (in Chinese). *Acta Aerodyn Sin*, 2005, 23: 330–333 [朱君, 赵宁. 一种MWENO格式的构造与应用. *空气动力学学报*, 2005, 23: 330–333]
- Einfeldt B, Munz C D, Roe P L, et al. On Godunov-type methods near low densities. *J Comput Phys*, 1991, 92: 273–295
- Linde T, Roe P L. Robust Euler codes. In: *Proceedings of the 13th Computational Fluid Dynamics Conference*, Snowmass Village, 1997, AIAA-97-2098
- Dou H S, Khoo B C. Effect of initial disturbance on the detonation front structure of a narrow duct. *Shock Waves*, 2010, 20: 163–173
- Wang C, Ma T B, Lu J. Influence of obstacle disturbance in a duct on explosion characteristics of coal gas. *Sci China Phys Mech Astron*, 2010, 53: 269–278
- Cockburn B, Shu C W. The Runge–Kutta discontinuous Galerkin method for conservation laws V: Multidimensional systems. *J Comput Phys*, 1998, 141: 199–224
- Shu C W, Osher S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. *J Comput Phys*, 1988, 77: 439–471
- Zhang X X, Shu C W. On positivity preserving high order discontinuous Galerkin schemes for compressible Euler equations on rectangular meshes. *J Comput Phys*, 2010, 229: 8918–8934
- Zhang X X, Shu C W. Positivity-preserving high order discontinuous Galerkin schemes for compressible Euler equations with source terms. *J Comput Phys*, 2011, 230: 1238–1248
- Zhang R, Zhang M, Shu C W. High order positivity-preserving finite volume WENO schemes for a hierarchical size-structured population model. *J Comput Appl Math*, 2011, 236: 937–949
- Zhang X X, Shu C W. Positivity preserving high order finite difference WENO schemes for compressible Euler equations. *J Comput Phys*, 2012, 231: 2245–2258
- Cheng J, Shu C W. Positivity-preserving Lagrangian scheme for multi-material compressible flow. *J Comput Phys*, 2014, 257: 143–168
- Wang C, Zhang X X, Shu C W, et al. Robust high order discontinuous Galerkin schemes for two-dimensional gaseous detonations. *J Comput Phys*, 2012, 231: 653–665
- Nobuyuki T, Asahara M, Eto K, et al. Numerical simulation of spinning detonation in square tube. *Shock Waves*, 2008, 18: 329–344
- Wang C, Bi Y, Han W, et al. Large-scale parallel computing for 3D gaseous detonation. *Procedia Eng*, 2013, 61: 276–283
- Hanana M, Lefebvre M H. Pressure profiles in detonation cells with rectangular and diagonal structures. *Shock Waves*, 2001, 11: 77–88

- 25 Moretti, G. Importance of boundary conditions in the numerical treatment of hyperbolic equations. *Phys Fluids*, 1969, 12: 13–20
- 26 Peskin C S. Flow patterns around heart valves: A numerical method. *J Comput Phys*, 1972, 10: 252–271
- 27 Farooq M A, Skøien A A, Müller B. Cartesian grid method for the compressible Euler equations using simplified ghost points treatments at embedded boundaries. *Comput Fluids*, 2013, 82: 50–62
- 28 Kreiss H O, Petersson N A, Yström J. Difference approximations for the second order wave equation. *SIAM J Numer Anal*, 2002, 40: 1940–1967
- 29 Sjögreen B, Petersson N A. A Cartesian embedded boundary method for hyperbolic conservation laws. *Commun Comput Phys*, 2007, 2: 1199–1219
- 30 Appelö D, Petersson N A. A fourth-order accurate embedded boundary method for the wave equation. *SIAM J Sci Comput*, 2012, 34: 2982–3008
- 31 Huang L, Shu C W, Zhang M. Numerical boundary conditions for the fast sweeping high order WENO methods for solving the Eikonal equation. *J Comput Math*, 2008, 26: 336–346
- 32 Xiong T, Zhang M, Zhang Y T, et al. Fifth order fast sweeping WENO scheme for static Hamilton-Jacobi equations with accurate boundary treatment. *J Sci Comput*, 2010, 45: 514–536
- 33 Goldberg M, Tadmor E. Scheme-independent stability criteria for difference approximations of hyperbolic initial-boundary value problems I. *Math Comput*, 1978, 32: 1097–1107
- 34 Tan S R, Shu C W. Inverse Lax-Wendroff procedure for numerical boundary conditions of conservation laws. *J Comput Phys*, 2010, 229: 8144–8166
- 35 Filbet F, Yang C. Inverse Lax-Wendroff method for boundary conditions of Boltzmann type models. *J Comput Phys*, 2013, 245: 43–61
- 36 Tan S R, Wang C, Shu C W, et al. Efficient implementation of high order inverse Lax-Wendroff boundary treatment for conservation laws. *J Comput Phys*, 2012, 231: 2510–2517
- 37 Vilar F, Shu C W. Development and stability analysis of the inverse Lax-Wendroff boundary treatment for central compact schemes. *Esaim-Math Model Num*, 2015, 49: 39–67
- 38 Wang R L, Liu Q, Wu Z H, et al. Advances in the adaptive grid methods on the area of science and engineering application (in Chinese). *Sci Technol Rev*, 2012, 30: 72–79 [王瑞利, 刘全, 吴子辉, 等. 科学与工程应用中自适应网格方法进展. *科学导报*, 2012, 30: 72–79]
- 39 Berger M J, Oliger J. Adaptive mesh refinement for hyperbolic partial differential equations. *J Comput Phys*, 1984, 53: 484–512
- 40 Norman M L. The impact of AMR in numerical astrophysics and cosmology. Adaptive mesh refinement-theory and applications. In: *Proceedings of the Chicago Workshop on Adaptive Mesh Refinement Methods*, 2005, 2: 413–430
- 41 Trebotich D, Straalen B V, Graves D, et al. Performance of embedded boundary methods for CFD with complex geometry. *J Comput Phys*, 2008, 125: 012083
- 42 Khokhlov A M. Fully threaded tree algorithms for adaptive mesh fluid dynamics simulations. *J Comput Phys*, 1998, 143: 543–519
- 43 Ji H, Lien F S, Yee E. A new adaptive mesh refinement data structure with an application to detonation. *J Comput Phys*, 2010, 229: 8981–8993
- 44 Berger M J, Saltzman J S. AMR on the CM-2. *Appl Numer Math*, 1994, 14: 239–253
- 45 Colella P, Crutchfield W Y. A parallel adaptive mesh refinement algorithm on the C-90. In: *Proceedings of the Energy Research Power Users Symposium*, 1994, 9: 11–12
- 46 Rendleman C A, Beckner V E, Lijewski M, et al. Parallelization of structured hierarchical adaptive, mesh refinement algorithms. *Comput Visual Sci*, 2000, 3: 137–147
- 47 Hendrickson B, Devine K. Dynamic load balancing in computational mechanics. *Comput Method Appl M*, 2000, 184: 485–500
- 48 Henshaw W D, Schwendeman D W. Parallel computation of three-dimensional flows using overlapping grids with adaptive mesh refinement. *J Comput Phys*, 2008, 227: 7469–7502
- 49 Teyssier R, Fromang S, Dormy E. Kinematic dynamos using constrained transport with high order Godunov schemes and adaptive mesh refinement. *J Comput Phys*, 2006, 218: 44–67
- 50 Fromang S, Hennebelle P, Teyssier R. A high order Godunov scheme with constrained transport and adaptive mesh refinement for astrophysical magnetohydrodynamics. *Astron Astrophys*, 2006, 457: 314–384
- 51 Baeza A, Mulet P. Adaptive mesh refinement techniques for high-order shock capturing schemes for multi-dimensional hydrodynamic simulations. *Int J Numer Meth Fl*, 2006, 52: 455–471
- 52 Shen C P, Qiu J M, Christlieb A. Adaptive mesh refinement on high order finite difference WENO scheme for multi-scale simulations. *J Comput Phys*, 2011, 230: 3780–3802
- 53 Dumbser M. High order space-time adaptive ADER-WENO finite volume schemes for non-conservative hyperbolic systems. *Comput Method Appl M*, 2014, 268: 395–387

- 54 Valorani M, Di Giacinto M. Performance assessment of an adaptive mesh refinement technique for detonation waves. In: Proceedings of 13th International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics. Berlin Heidelberg: Springer, 1993. 300–304
- 55 Valorani M, Di Giacinto M. Numerical simulation of high speed reactive flows with adaptive mesh refinement. In: Proceedings of the 4th International Conference on Hyperbolic Problems. Braunschweig: Friedr Vieweg & Sohn, 1993. 565–577
- 56 Quirk J J. A parallel adaptive grid algorithm for computational shock hydrodynamics. *Appl Numer Math*, 1996, 20: 427–453
- 57 Sharpe G J, Falle S A E G. Two-dimensional numerical simulations of idealized detonations. *P Roy Soc Lond A*, 2000, 456: 2081–2100
- 58 Loth E, Sivier S, Baum J. Adaptive unstructured finite element method for two-dimensional detonation simulations. *Shock Waves*, 1998, 8: 47–53
- 59 Deiterding R. Detonation simulation with the AMROC framework. *Lect Notes Comput Sci*, 2005, 372: 916–927
- 60 Deiterding R. Parallel adaptive fluid-structure interaction simulation of explosions impacting on building structures. *Comput Fluids*, 2013, 88: 719–729
- 61 Ravindran P, Lu F K. Multi-dimensional adaptive simulation of shock-induced detonation. In: Proceedings of the 39th AIAA Fluid Dynamics Conference. Gyeongju, 2009. No. 3D-3
- 62 Cao J, Zhou G, Wang C, et al. A hybrid adaptive finite difference method powered by a posteriori error estimation technique. *J Comput Appl Mathes*, 2014, 259: 117–128
- 63 Amsden A A. The partial-in cell method for the calculations of the dynamics of compressible fluids. Technical Report LA-3466, Los Alamos Scientific Laboratory, 1966
- 64 Gentry R A, Martin R E, Daly B J. An Eulerian differencing method for unsteady compressible flow problems. *J Comput Phys*, 1966, 1: 87–118
- 65 Hardlow F H, Welch J E. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Phys Fluids*, 1965, 8: 21–82
- 66 Amsden A A, Harlow F H. The SMAC method: A numerical technique for calculating incompressible fluid flow. Technical Report LA-4370, Los Alamos Scientific Laboratory, 1970
- 67 Tome M F, McKee S. GENSMAC: A computational marker and cell method for free surface flows in general domains. *J Comput Phys*, 1994, 110: 171–186
- 68 Sulsky D, Chen Z, Schreyer H L. A particle method for history-dependent materials. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 1994, 118: 179–196
- 69 Zhang X, Sze K Y, Ma S. An explicit material point finite element method for hyper-velocity impact. *Int J Numer Meth Eng*, 2006, 66: 689–706
- 70 Lian Y P, Zhang X, Liu Y. Coupling of finite element method with material point method by local multi-mesh contact method. *Comput Meth Appl Mech Eng*, 2011, 47: 3482–3494
- 71 Hirt C W, Nichols B D. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *J Comput Phys*, 1981, 39: 201–225
- 72 Noh W F, Woodward P. SLIC(simple line interface calculation). In: Proceedings of the 15th international conference on numerical methods in fluid dynamics. Springer Lecture Notes in Physics, 1976, 59: 330–340
- 73 Youngs D L. Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion. In: Morton K W, Baines M J, eds. *Numerical Methods for Fluid Dynamics*. Pittsburgh: Academic press, 1982. 273–285
- 74 Ashgriz N, Poo J Y. FLAIR: Flux line-segment model for advection and interface reconstruction. *J Comput Phys*, 1991, 93: 449–468
- 75 Feng Q J, He C J, Zhang M, et al. Calculation of mixed cells in simulating high-speed collision problems with two-dimensional Eulerian hydrodynamic method (in Chinese). *Chin J Comput Phys*, 2003, 20: 147–152 [冯其京, 何长江, 张敏, 等. 二维高速碰撞问题欧拉数值模拟的混合网格计算. *计算物理*, 2003, 20: 147–152]
- 76 He C J, Yu Z L, Feng Q J. 3D Eulerian numerical simulation method of high speed impact (in Chinese). *Explos Shock Waves*, 1999, 19: 216–221 [何长江, 于志鲁, 冯其京. 高速碰撞的三维欧拉数值模拟方法. *爆炸与冲击*, 1999, 19: 216–221]
- 77 Poo J Y, Ashgriz N. A computational method for determining curvatures. *J Comput Phys*, 1989, 84: 483–491
- 78 Dyadechko V, Shashkov M. Moment-of-fluid interface reconstruction. Technical Report LA-UR-05-7571, Los Alamos National Laboratory, 2005
- 79 Jia Z P. A multi-material arbitrary lagrangian-eulerian method based on MOF interface reconstruction (in Chinese). *Chin J Comput Phys*, 2010, 27: 353–360 [贾祖朋. 基于MOF界面重构的多物质ALE方法. *计算物理*, 2010, 27: 353–360]
- 80 Feng Q J, Liu J, Wang Y J, et al. Interface reconstruction based on volume and centroid-of-volume in two dimensional axisymmetry geometry (in Chinese). *Sci China Phys Mech Astron*, 2014, 44: 203–211 [冯其京, 刘军, 王言金, 等. 二维轴对称坐标下基于介质形心和体积的界面重构方法. *中国科学: 物理学 力学 天文学*, 2014, 44: 203–211]
- 81 Ning J G, Chen L W. Fuzzy interface treatment in Eulerian method. *Sci China Ser E Eng Mater Sci*, 2004, 47: 550–568
- 82 Wang X, Ma T B, Ning J G. A pseudo arc-length method for numerical simulation of shock waves. *Chin Phys Lett*, 2014, 31: 030201

- 83 Ning J G, Ma T B, Fei G L. Multi-material Eulerian method and parallel computation for 3D explosion and impact problems. *Int J Comp Meth*, 2014, 11: 1350079
- 84 Ning J G, Ma T B, Lin G H. A grid generator for 3-D explosion simulations using the staircase boundary approach in Cartesian coordinates based on STL models. *Adv Eng Softw*, 2014, 67: 148–155
- 85 Osher S, Sethian J A. Fronts propagating with curvature dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *J Comput Phys*, 1988, 79: 12–49
- 86 Enright D, Fedkiw R, Ferziger J, et al. A hybrid particle level set method for improved interface capturing. *J Comput Phys*, 2002, 183: 92–116
- 87 Fedkiw R P, Aslam T, Merriman B, et al. A non-oscillatory eulerian approach to interfaces in multi-material flows (the ghost fluid method). *J Comput Phys*, 1999, 152: 457–492
- 88 Liu T G, Khoo B C, Yeo K S, et al. Underwater shock-free surface–structure interaction. *Int J Numer Method Eng*, 2003, 58: 609–630
- 89 Liu T G, Khoo B C, Xie W F. The modified ghost fluid method as applied to extreme fluid-structure interaction in the presence of cavitation. *Comm Comput Phys*, 2006, 1: 898–919
- 90 Wang C W, Liu T G, Khoo B C. A real ghost fluid method for the simulation of multimedium compressible flow. *SIAM J Sci Comput*, 2006, 28: 278–302
- 91 Qiu J X, Liu T G, Khoo B C. Runge-Kutta discontinuous Galerkin methods for compressible two-medium flow simulations: one-dimensional case. *J Comput Phys*, 2007, 222: 353–373
- 92 Qiu J X, Liu T G, Khoo B C. Simulations of compressible two-medium flow by Runge-Kutta discontinuous Galerkin methods with the ghost fluid method. *Comm Comput Phys*, 2008, 3: 479–504
- 93 Kim K H, Yoh J J. A particle level-set based Eulerian method for multi-material detonation simulation of high explosive and metal confinements. *P Combust Inst*, 2013, 34: 2025–2033
- 94 Tran L B, Udaykumar H S. A particle-level set-based sharp interface Cartesian grid method for impact, penetration, and void collapse. *J Comput Phys*, 2004, 193: 469–510
- 95 Wang J T, Liu K X, Zhang D L. An improved CE/SE schemes for multi-material elastic-plastic flows and its applications. *Comput Fluids*, 2009, 38: 544–551
- 96 Chen Q Y, Wang J T, Liu K X. Improved CE/SE scheme with particle level set method for numerical simulation of spall fracture due to high-velocity impact. *J Comput Phys*, 2010, 229: 7503–7519
- 97 Chen Q Y, Liu K X. A high-resolution Eulerian method for numerical simulation of shaped charge jet including solid-fluid coexistence and interaction. *Comput Fluids*, 2012, 56: 92–101
- 98 Chen S Y, Wu Z W, Liu K X, et al. Atomic diffusion behavior in Cu-Al explosive welding process. *J Appl Phys*, 2013, 113: 044901
- 99 Zhao H T, Wang C. High resolution numerical simulation of air explosion (in Chinese). *Acta Armamentarii*, 2013, 34: 1536–1546 [赵海涛, 王成. 空中爆炸的高精度数值模拟研究. *兵工学报*, 2013, 34: 1536–1546]
- 100 Zhao H T, Wang C, Ning J G. High resolution numerical simulation of compressible multi-medium flow (in Chinese). *Chin J High Pressure Phys*, 2013, 27: 261–267 [赵海涛, 王成, 宁建国. 可压缩多介质问题的高精度数值模拟. *高压物理学报*, 2013, 27: 261–267]
- 101 Falcovitz J, Birman A. A singularities tracking conservation laws scheme for compressible duct flows. *J Comput Phys*, 1994, 115: 431–439
- 102 Hilditch J, Colella P. A front tracking method for compressible flames in one dimension. *SIAM J Sci Comput*, 1995, 16: 755–772
- 103 Glimm J, Graham M J, Grove J. Front tracking in two and three dimensions. *J Comput Math*, 1998, 35: 1–12
- 104 Du J, Fix B, Glimm J, et al. A simple package for front tracking. *J Comput Phys*, 2006, 213: 613–628
- 105 Qian J, Tryggvason G, Law C K. A front tracking method for the motion of premixed flames. *J Comput Phys*, 1998, 144: 52–69
- 106 Esmaeeli A, Tryggvason G. A front tracking method for computations of boiling in complex geometries. *Int J Multiphas Flow*, 2004, 30: 1037–1050
- 107 Mao D K. A shock tracking technique based on conservation in one space dimension. *SIAM J Numer Anal*, 1995, 32: 1677–1703
- 108 Mao D K. Towards front-tracking based on conservation in tow space dimensions II, tracking discontinuities in capturing fashion. *J Comput Phys*, 2007, 226: 1550–1588
- 109 Wen W Z. A method of marker on cell line (MOCL) for tracking interfaces in Eulerian code (in Chinese). *Acta Armamentarii*, 1999, 20: 212–216 [温万治. 欧拉程序中描述分界面的网格线示踪点法(MOCL). *兵工学报*, 1999, 20: 212–216]
- 110 Wang C, Ning J G, Ma T B. Numerical simulation of detonation and multi-material interface tracking. *Comput Mater Con*, 2011, 22: 73–96

Progress in high-resolution numerical simulation of explosion mechanics

WANG Cheng¹ & SHU Chi-Wang²

¹ State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China;

² Division of Applied Mathematics, Brown University, Providence RI 02912, USA

High-resolution numerical simulation of explosion problems is of significant theoretical value owing to the numerous potential applications in both national defense and civilian projects, such as ammunition design, damage assessment, target protection, and industrial gas explosion prevention. In this paper, we review the research history of explosion mechanics and present the highest-order numerical simulation in decades. Building upon the author's research work in recent years, we specifically discuss the development of high-order positivity-preserving schemes, high-order boundary treatment, an adaptive mesh method, and multi-material interface treatment. We extended the WENO and RKDG methods and constructed conservative positivity-preserving high-order schemes. The problems of negative density and pressure were solved through the simulation of complex detonation propagation. The detonation wave front structure and flow characteristics were captured clearly. In this paper, a high-order inverse Lax-Wendroff method on a Cartesian mesh is presented to treat the complex boundary. The main principle is that the first-order normal derivative can be obtained by the inverse Lax-Wendroff method, while all the higher-order normal derivatives can simply be obtained by fifth-order WENO-type extrapolation. The efficient implementation in the detonation process further indicates that the inverse Lax-Wendroff method is stable and robust when applied to a complex-geometry boundary. An a posteriori error estimate, which is often used as a refinement criterion, is applied to solve the Euler equations. To achieve mesh refinement, WENO and Hermite interpolations are used to prolong the solutions from coarse to fine grid in space and time, respectively. For mesh merging, the direct point value replacement method is employed to update the solutions of coarse grids. For this study, a local level-set tracking method was developed to treat the multi-material interface, and the velocity field in the computational domain was modified in order to effectively avoid errors caused by velocity field discontinuity when the interface position was solved. The method presented in this paper combines the GFM (Ghost Fluid Method) with the RGFM (Real Ghost Fluid Method) to deal with the material interface, thereby avoiding non-physical solutions when the GFM is used to deal with a strong discontinuity, and the CPU running time is increased when RGFM is employed to deal with a weak discontinuity in solving the Riemann problem repeatedly. Finally, the future of high-order numerical simulation of explosion mechanics is discussed.

explosion mechanics, high-resolution, numerical simulation, multi-material interface, parallel computation

doi: 10.1360/N972014-00936