

部分体积的计算和HELP 程序的改进

梁德寿

(1983年1月27日收到)

本文介绍了混合格中每种材料所占部分体积的计算方法,并在此基础上介绍了“问题建立子程序”的标准化和提高混合格材料输运量计算精确度的方法。

前 言

HELP程序是计算二维不定常流体弹塑性体运动的通用程序,该程序在材料块的边界上按一定的顺序和方向设置若干无质量示踪点,示踪点随其所在位置的材料一起运动。按顺序连接示踪点就可以得出任意时刻材料块的明晰界面,所以HELP虽是欧拉方法,但可以处理多种材料的相互作用问题。

HELP程序中处理交界面格的逻辑是相当复杂的,但由于欧拉方法中交界面问题的复杂性,它对交界面格的处理结果还是不能令人满意。计算过程中交界面(包括自由面)附近出现种种异常,例如含自由面格压力太高和变空等不合理现象。这类问题的产生,当然是由于对交界面格的压力效应、输运效应和强度效应的计算不合理或计算粗糙而引起的。本文主要讨论混合格的输运问题。

HELP程序通过任意时刻示踪点的位置来确定各混合格同每块材料相关的部分面积,由部分面积、速度分佈和密度分佈计算通过混合格界面每种材料的流量。

文献〔1〕中计算混合格流量时,采用时间步长开始时刻的部分面积。本文采用步长始、末两端部分面积的平均值以提高质量输运量的计算精度,这样作不会明显增加程序的复杂性和降低计算速度。

〔1〕中混合格材料密度的确定也较粗糙。本文根据计算得到的每种材料的部分体积准确地计算其密度并用于输运量计算以提高计算精度。

此外,有了部分体积,可以进行比〔1〕更为合理的流量调整。

〔1〕中的“问题建立子程序”十分烦杂,功能也很差,能够建立的问题种类太少。我们在部分体积的基础上将其标准化、通用化了,并使它的功能大大提高。

可见,部分体积的计算是提高HELP程序功能的关键之一。

部分体积的计算在逻辑上比部分面积复杂得多,但还是可以实现的。已编制的部分体积

计算子程序不算太长,共100句,由部分面积计算子程序调用。逻辑分析和计算结果都表明,该程序在示踪点任意分佈的情况下,都能准确地计算出每种材料占的部分体积。

一、部分体积的计算方法

1. $INCY1=INCY2$ 时部分体积的计算

本文所涉及的工作都是以部分体积为基础的,没有部分体积的计算就不可能有“问题建立子程序”的标准化和输运计算的精确化。

部分体积的计算比部分面积更为复杂,这是由于部分面积只取决于界面和格边界的相交情况,而部分体积则和整个格面上交界面的分佈和形状有关。

HELP程序中,材料块边界上的示踪点按一定的方向和顺序排列,当沿示踪点序号走时,材料在左手边。如图1中材料块I的示踪点是按1到5排列的。

我们采用图1所示的方法求材料块I的部分体积。从2、3、4各点分别引水平线与格垂直边相交,分别求出每相邻两示踪点(或示踪点连线与格边界交点)对应的小体积,并以此为基础求部分体积。

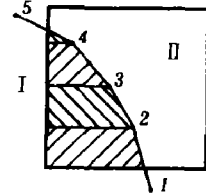


图1

引入两个简单变量 $INCY1$ 和 $INCY2$ 。当正在扫描的两示踪点中第二点的 y 坐标大时(如图1),取 $INCY2=1$,反之取 $INCY2=-1$ 。 $INCY1$ 的定义和 $INCY2$ 相同,但表示的是前面两示踪点的情况。例如,假设 $INCY2$ 表示的是图1中3、4点的情况,则 $INCY1$ 表示的是2、3点的情况。

当交界面一次进出某格子始终有 $INCY1=INCY2$ 时,则将每次求得的小体积相加就可以得到部分体积了,图1所示的正是这种情况。

2. $INCY1 \neq INCY2$ 时部分体积的计算

这种情况比较复杂,需再引入七个简单变量。

$RESL1$ 和 $RESL2$: $RESL2$ 是正被扫描的两示踪点连线斜率的倒数, $RESL1$ 表示前面两示踪点连线斜率的倒数。

$YTOP$ 和 $YBOT$: $YTOP$ 指该材料界面进入(指最近一次进入)该格以后所达到的 y 坐标的最大值(包括正被扫描的两示踪点),反之 $YBOT$ 则表示达到的 y 坐标的最小值。

$MINUS$, $ISETOP$ 和 $ISEBOT$: 当 $MINUS=1$ 时,表示在计算部分体积时需减去与正被扫描的两示踪点对应的矩形截面园环的体积, $MINUS=0$ 时不减。当 $ISETOP=1$ 时表示已预置过与格顶某矩形相应的园环的体积, $ISETOP=0$ 时则表示尚未预置。 $ISEBOT$ 的定义和 $ISETOP$ 相似,只是表示的是格子底部体积的预置问题。

下面分两种情况进行讨论。

1) $INCY1=1, INCY2=-1$, 又可分成两种情况。

a) $RESL1 > RESL2$, 此种情况如图2所示。

正被扫描的第2点和第3点对应的小体积(与梯形23EC对应的园环体积)与前面已累加过的体积(与BFGI2对应)不重迭,让 $MINUS=0$ 。另外,如果此时 $ISETOP=0$,而且2点的 y 坐标 $y_2=YTOP$,则需在部分体积中加上矩形ABCD所对应的园环体积,并

让 $ISETOP = 1$ ，表示已加过顶部体积。如果 $y_2 < YTOP$ ，如图3所示（此时 $YTOP$ 等于格顶边的 y 坐标）就不加顶部 $ABCD$ 对应的体积。

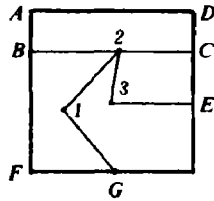


图2

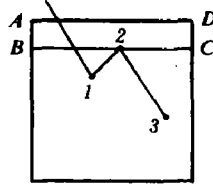


图3

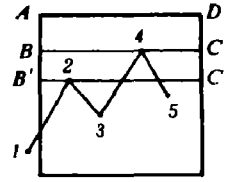


图4

如果 $ISETOP$ 已等于 1，说明在前面扫描中已加过顶部体积，就不能再加了。以图4为例，扫描到第2第3点时加过与 $AB'C'D$ 对应的体积并让 $ISETOP = 1$ ，故扫描到第4第5点时，已有 $ISETOP = 1$ ，就不再加与 $ABCD$ 对应的体积了，以免加重。

b) $RESL_1 < RESL_2$ ，此种情况如图5所示。

这里正被扫描的 2、3 点对应的体积（与 $23C'C$ 对应）与前面已累加过的体积（与 $BEF12$ 对应）有重叠部分，此时除加上 2、3 点对应的体积外，还应减去 $BB'C'C$ 对应的体积，并让 $MINUS = 1$ ，这样得到的是与 $B'EF123$ 对应的园环体积。

$MINUS = 1$ 表示扫描下面两示踪点时，如果有 $INCY_1 = INCY_2$ ，也要如上述减去与某矩形对应的体积。例如图6中扫描到3、4点时有 $INCY_1 = INCY_2 = -1$ ， $MINUS = 1$ ，此时要加上与 $34CD$ 对应的体积，减去与 $ABCD$ 对应的体积，得到是与 $BEF1234$ 对应的体积。

如果 $MINUS = 0$ 则不作这种减法。例如图2所示的情况，当扫描到 2、3 点时定义了 $MINUS = 0$ ，当扫描到 3、4 点时，虽也有 $INCY_1 = INCY_2 = -1$ ，但也不减去与 $ABCD$ 对应的体积，如图7所示。

再回到图5上来，如果此时 $ISETOP = 1$ 而且 $y_2 = YTOP$ ，则需减去与 $ABCD$ 对应的体积。例如图8所示的情况，当扫描到 2、3 点时加上了与矩形 $AB'C'D$ 对应的体积，并使 $ISETOP = 1$ ，当扫描到 4、5 点时，前面累加得到的部分体积与 $AEF234CD$ 对应，此时除加上 $C'C45$ 对应的体积，减去 $BB'C'C$ 对应的体积外，还要减去 $ABCD$ 对应的体积，因此，第4第5点扫描结束时得到了与 $B'EF2345$ 相应的部分体积。

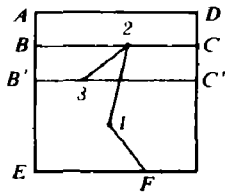


图5

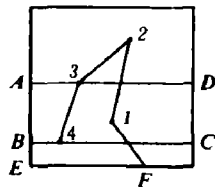


图6

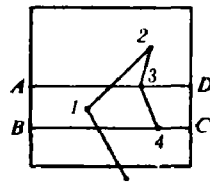


图7

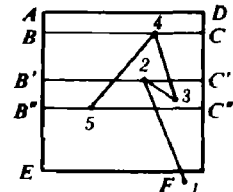


图8

图9所示的情况不同，此时 $y_2 < YTOP$ ，而且 $ISETOP = 0$ ，所以不减去 $ABCD$ 对应的体积。

对于图10所示的情况,当扫描到2、3点时,加上了 $ABCD$ 对应的体积,并让 $ISETOP = 1$,当扫描到4、5点时,虽然 $ISETOP = 1$,但 $y_4 < YTOP$,所以不减去 $AB'C'D$ 对应的体积。对于图11所示的情况,虽然 $y_2 = YTOP$,但是 $ISETOP = 0$,所以不减去 $ABCD$ 对应的体积。

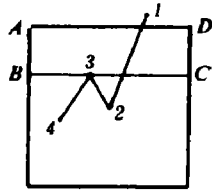


图 9

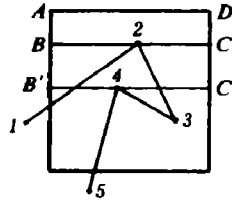


图10

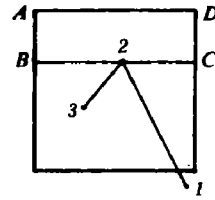


图11

2) $INCY1 = -1, INCY2 = 1$, 此种情况同1) 极相似, 讨论从略。

3. 材料界面跨入和离开格子的处理

从材料界面跨入格子起开始对其部分体积进行计算,从格顶边和底边跨入的情况不需处理;从格左、右边跨入时(不论是水平方向跨入或非水平方向跨入)需进行处理。

材料界面离开格子后,对该材料部分体积的计算暂告结束,当该材料界面再跨入该格时,计算重新开始,并同前面的计算结果累加。同跨入的情况一样,只需处理从格子左、右边离开的情况。

跨入和离开的处理方法,根据前面两节的方法不难推出,这里从略。

4. 格内两相邻示踪点连线水平情况的处理

这种情况在计算过程中几乎不会出现,所以可以采用“跳过去”的方法,以免增加一段作用不大而冗长的程序。即使出现了这种情况,“跳过去”的方法一般也会得出正确的结果。

5. 材料界面多次进出同一格情况的处理

程序不需判断交界面几次进出某格,只需在累计部分体积时随时检查其是否大于格子总体积,如果大于的话,减去格总体积就会得到正确的结果。

二、“问题建立子程序”的标准化

“问题建立子程序”的主要任务有三点:设置网格,设置示踪点,计算格子量及混合格数组初始量。最复杂的是计算混合格数组初始量,它是以初始部分体积的计算为前提的。由于我们找到了随示踪点扫描计算混合格中各材料部分体积的通用方法,因而改变了该子程序的逻辑结构并使其大大简化了。其逻辑结构大体如下:

1. 设置网格。该部分程序根据数据文件的数据自动设置等间距和不等间距网格。

2. 设置示踪点。沿材料表面按一定的方向、顺序和步长设置示踪点。对于直线段,只需给出两端点的示踪点。示踪点设置好以后,就调用示踪点加密子程序,在直线段的首尾间添加示踪点。

3. 调用部分面积和部分体积计算子程序,确定混合格旗号及混合格中每种材料占的部分面积和部分体积。

4. 确定纯格旗号。某格 K 如果是纯格,则其旗号可以由其左格 KL 定,如果 KL 是纯格,则 K 格的旗号和 KL 相同;如果 KL 是混合格,则只需找到 KL 右边界的面积是属于哪

块材料的就可以确定 K 格的旗号。同样, K 格的旗号也可以由其下格 KB 来定。因而只要知道左下角第一格的旗号就可以确定全场纯格的旗号。左下角第一格的旗号由程序根据数据文件判断。

5. 计算包括混合格在内的所有格子量及混合格数组量。知道了格体积及混合格中每块材料占的部分体积, 不难计算所有的格子量及混合格数组量。

标准化以后的“问题建立子程序”可以根据不同的数据文件建立很多种类的二维问题, 功能比文献[1]大大提高。

三、提高混合格流量计算的精确度

为提高混合格流量计算的精确度, 采取了以下几方面措施:

1. 用平均部分面积计算混合格质量流量

在文献[1]中是先计算每一时间步长初始时刻 T 的部分面积, 并由此计算流量, 然后再将示踪点移动到该时间步长末 $T + \Delta T$ 时刻位置。计算流量只考虑 T 时刻而不考虑 $T + \Delta T$ 时刻界面的位置, 这样处理有两个缺点, 一是流量计算粗糙, 不如取 T 和 $T + \Delta T$ 两时刻部分面积的平均值好, 二是流量调整不易安排得合理以保证质量的输运和界面的运动协调。

事实上只要将文献[1]的逻辑顺序稍加改变, 即先把示踪点移动到 $T + \Delta T$ 时刻的位置, 再求相应的部分面积, 并根据储存的 T 时刻的部分面积, 求其平均值并用于流量计算, 就可以提高计算精度。

如果只根据 T 时刻的部分面积求流量, 当流速较大时, 特别是高能气体向真空膨胀时产生的误差很大。例如计算高能气体一维膨胀时(如图 12 所示)就是这样。

图 12 中实线为网格线, 两条虚线分别表示 T 和 $T + \Delta T$ 时刻界面的位置。在 ΔT 时间间隔内, 界面从 KA 格下移到 K 格。但按文献[1]中的处理方法, 在 ΔT 内却没有质量从 KA 格向 K 格输运, 因为 T 时刻材料的部分面积为零。这样处理会使 KA 格积聚过多的质量, 而 K 格变成空格。流速越大, 问题就越突出, 而且, T 时刻界面位置越接近 K 格顶边界, 这种误差就越大, 其最大值为全面积在 ΔT 时间内向下的总流量。

如果先移示踪点再算部分面积, 那么在 $T + \Delta T$ 时刻部分面积为全面积, T 和 $T + \Delta T$ 时刻的平均部分面积为全面积的一半, 就会有质量从 KA 格输运到 K 格, K 格就不会为空格, KA 的材料聚积现象也会得到改善。而且不难看出这样处理的最大误差为前一种处理方法的一半。

在一般二维情况下, 设想 T 和 $T + \Delta T$ 时刻材料块 I 和 II 的交界面的位置如图 13 中虚线所示。设 K 格上边界上材料块 I 的部分面积分别为 S_1 和 S_2 , 那么任一时刻 t ($T < t < T + \Delta T$) 的部分面积为

$$S = S_1 + \frac{S_2 - S_1}{\Delta T}(t - T)$$

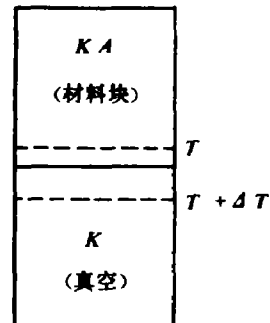


图 12

在 ΔT 时间内材料块 I 通过 K 格上边界的流量为

$$\Delta m = \int_T^{T+\Delta T} \rho S v dt$$

式中 ρ 为密度, v 为速度。将 S 代入得到

$$\begin{aligned} \Delta m &= \int_T^{T+\Delta T} \rho v \left[S_1 + \frac{S_2 - S_1}{\Delta T} (t - T) \right] dt \\ &= \frac{1}{2} \rho v (S_1 + S_2) \Delta T \end{aligned}$$

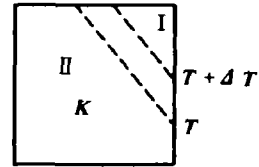


图13

在 ΔT 内 ρ 和 v 视为常数。

可见在此情况下, 用平均部分面积得到的是精确值。一般情况下得到的不见得是精确值, 但其误差也会减少很多。

2. 用计算的材料密度进行输运

文献[1]中没有计算混合格中每种材料的部分体积, 因而无法准确地确定其密度, 其值是在建立混合格时从邻格取来的或在压力迭代时调整的。该密度值同材料的质量和界面位置通常是不协调的, 即由界面位置确定的部分体积同密度的乘积不等于材料的质量。用该密度进行输运, 会使输运量同材料界面的运动不协调。

新方案用部分体积求真实密度并用于输运计算, 就使混合格及附近纯格的质量分布更合理。

3. 界面离开某格及可能产生负质量时的流量调整

文献[1]对材料界面离开某格但还有剩余质量没有抽出的情况进行了流量调整, 将剩余的质量抽出。它对于可能产生负质量的情况不进行判别和调整, 而让其“超空”(负质量), 在输运效应子程序(PH2)之后, 将负质量处理成零质量。处理的方法是从邻格取, 取不到时就用所谓“蒸发”。这种处理方法比较消极, 由某一邻格弥补及将负质量处理成无质量显然都不合理, 既然材料在该格占有体积就应有负质量留下。

新的流量调整方案是在流量计算之后, 除对界面离开格进行流量调整外, 还要检查哪些混合格哪种材料的质量可能变负并对其流量进行调整, 保证输运以后该材料仍有一定的质量留下。

如果用 M_{or} 和 M_{en} 分别表示 T 和 $T + \Delta T$ 时刻某混合格中某材料的质量, F 表示各方向的质量流量, 那么有

$$M_{or} - \sum F = M_{en}$$

当材料界面离开该格、部分体积为零时, 就对 F 按比例调整使

$$M_{or} - \sum f = 0$$

f 是调整以后的流量。

当材料的部分体积大于零而且 M_{en} 小于或等于零时, 也对 F 按比例调整以使 M_{en} 为正。应当有 $M_{en} = \rho \bar{V}$, 其中 \bar{V} 是部分体积, ρ 是密度。为使流量调整不会对邻格产生太大的影响, 可以适当减小 M_{en} 的值, 例如取下式

$$Mor - \sum f = 0.3 \rho \bar{V}$$

这样处理的结果是没有“超空”现象产生,它使材料的质量和部分体积相协调,从根本上消除不合理的空格。

四、其他修改及新程序的试算情况

1. 其他修改

1) 用部分体积加权求混合格压力。先求混合格中每种材料的压力,然后用部分体积加权求格子压力。

用迭代法求压力似乎最合理,实际并不如此,除费时外,如前所述,迭代得到的密度和体积通常与示踪点确定的界面位置不符,计算的流量和界面的移动不协调。新方案不存在这一矛盾。

2) 用部分体积判断变纯格。

3) 由于HEL P逻辑结构的变化必须对很多子程序进行调整。

2. 新程序试算情况

1) 关于部分体积计算

在HEL P中增加部分体积检查和打印程序。对多种方案进行了打印检查,证明了在示踪点的各种分佈情况下计算结果都是正确的。

2) 关于“问题建立子程序”

用新程序和不同数据文件一次上机计算,并打印了十多种方案的初始量,结果都是对的。

3) 计算射流形成问题

计算射流形成时,必须对对称轴附近的射流示踪点加以处理。新程序增加了这部分内容,并在瞬时爆轰假设下计算了射流形成过程。

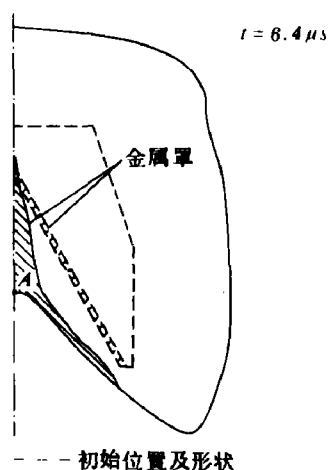


图14 爆炸产物的飞散及药型罩的变形

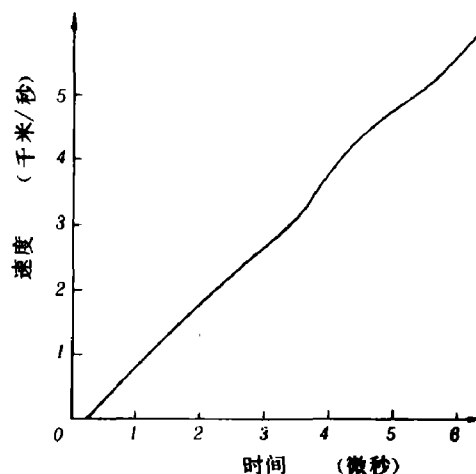


图15 对称轴心A点的轴向速度-时间关系曲线

由于经费的原因只算到6.7微秒,在6.4微秒时打印的爆轰产物的膨胀及罩的变形如图14

所示,此时射流尚未突出,但A点材料的轴向速度已增加到 6140 m/sec ,说明射流头部即将形成。A点材料的轴向速度随时间的增长规律如图15所示,基本上是线性的。

分析认为,在瞬时爆轰假设下,图15所示的计算结果是合理的,它符合射流头部是由罩中部附近微元形成的结论。

参 考 文 献

- (1) Hageman, L. J., Walsh, J. M., AD 726459, Vol. I. AD 726460, Vol. II, (1971).

CALCULATION OF FRACTIONAL VOLUMES AND IMPROVEMENTS OF HELP PROGRAM

Liang Deshou

Abstract

This article describes a computing method for fractional volumes in a grid with different materials. Fractional volumes are obtained from the data about the positions of tracers. Based on this method, both the standardization of the subroutine for "generating problem" and the way to increase the accuracy in evaluating mass transport are presented.