

基于等熵曲线与 Hugoniot 曲线下的一种防奇点 Mie-Grüneisen 多介质混合模型*

吴宗铎¹, 严谨¹, 庞建华², 孙一方¹, 张大朋¹

(1. 广东海洋大学船舶与海运学院, 广东 湛江 524088;
2. 广东海洋大学深圳研究院, 智能海洋工程中心 518055)

摘要: Mie-Grüneisen 多介质混合模型可以很方便地应用于 Mie-Grüneisen 状态方程下的多介质问题中。在 Mie-Grüneisen 状态方程中, 等熵与 Hugoniot 绝热曲线是两种典型的参考状态曲线。然而, 这两类曲线存在奇点, 利用体积分数进行界面处理时则会造成困难, 而传统混合模型却习惯将体积分数作为色函数来使用。其中的难点在于体积分数模型会因界面的扩散形态而产生零碎的流体体积。这些零碎的体积使得部分等熵曲线中会出现声速在界面附近不合理的偏高, 并在收敛性条件下需要耗费更多的时间步来计算。另一方面, 奇点会使得 Hugoniot 参考状态曲线下声速出现负值, 阻断计算的进行。为了避免产生零碎的体积, 这里将质量分数代替体积分数, 并将流场中占一定比例的介质密度的倒数定义为比容。重定义后的比容, 可以使得相对体积不小于流场整体的相对体积。这样, 声速在界面附近形成一个低谷形状并避免出现峰值。另外, Mie-Grüneisen 混合模型中部分方程含有参考状态参数的导数项, 这些导数项在界面附近被定义成加权平均, 但如果用质量分数直接做加权平均容易出现负值。为了保证界面附近不出现负值, 对界面处的参考状态进行了优化。数值算例表示, 质量分数虽然对计算结果的影响十分微弱, 但是它可以在等熵状态曲线下保证声速稳定, 从而使用比体积分数更少的时间步。同时, 质量分数还能在 Hugoniot 曲线下很好的处理声速的负值。这样可以保证计算既平稳又准确。

关键词: Mie-Grüneisen 混合模型; Mie-Grüneisen 状态方程; 防奇点; 参考状态
中图分类号: O359+1 **国标学科代码:** XXXXX **文献标识码:** A

An Anti-Singularity Mie-Grüneisen Mixture Model Based on Isentropic and Hugoniot curves

WU Zongduo¹, YAN Jin^{1,2}, PANG Jianhua², SUN Yifang¹, ZHANG Dapeng¹

(1. Ship and Marine College, Guangdong Ocean University, Guangdong;
2. Ocean intelligence technology center, Shenzhen Institute of Guangdong Ocean university, Shenzhen, China)

Abstract: The Mie-Grüneisen mixture model is conveniently used in the multi-component problem with Mie-Grüneisen EOS (equation of states). In the Mie-Grüneisen EOS, the isentropic and Hugoniot curves are two typical reference states curves. However, the curves of these two reference states contain singularity points and cause difficulty when the interface is treated by volume fraction, which is accustomed used as a color function in traditional model. The difficulty lies in that the volume

***收稿日期:** 2025-04-01; **修回日期:** 2025-09-15;
基金项目: 广东省基础与应用基础研究基金(2024A1515012815); 湛江市海洋青年人才创新项目(2021E5007); 国家自然科学基金(11702066);
第一作者: 吴宗铎 (1984-), 男, 博士, 副教授. E-mail: wuzongduo0@aliyun.com;
通信作者: 庞建华 (1986-), 男, 博士, 教授. E-mail: njpjh@sina.com.

Comment [t1]: 删除内容

Comment [t2]: 删除内容

Comment [t3]: 删除内容

fraction model produces fragments of fluid volumes near the interface due to its diffused style, these volume fragments may encounter the singularity points and make the sound velocity abnormally high at the interface in some isentropic reference curves. On the other side, the singularity points may cause the sound velocity negative for some Hugoniot reference states and interrupt the calculation. To avoid volumes fragments near the interface area, the volume fraction is replaced by mass fraction, and the relative volume is defined by the reciprocal of proportional density of fluid component. This definition makes the relative volume no less than which of fluids mixture. Thanks to the reconstructed relative volume, the sound velocity forms a trough shape at the interface and does not cause high peak value. Moreover, some equations in Mie-Grüneisen mixture model contains the derivatives items of reference states parameters, when these items are defined as weighted average mixture at the interface, they often become negative if weighted average of mass fraction are directly used. To prevent the negative value at the interface, the reference states are optimized at the interface. Numerical examples show that the mass fraction has tiny improvement on the accuracy of results, it makes the sound velocity steady on the isentropic reference states of medium and spend less time steps than volume fraction model. And the mass fraction can be used to correct the negative sound velocity in Hugoniot reference states. Then the calculation is kept smooth and accurate.

Keywords: Mie-Grüneisen mixture model; Mie-Grüneisen equation of states; anti-singularity; reference states

多介质的激波间断问题长期以来都是计算流体力学方面的一个备受关注的问题。在该问题的计算中，状态方程则成为一个关键要素，它不仅与流体介质的物理特性关联紧密，也对计算方法有着十分重要的影响。而 Mie-Grüneisen 状态方程作为一种形式灵活，适应性强的状态方程，可概括多种常见流体和固体的物理特性。

Mie-Grüneisen 状态方程建立在压力与内能关系之上，但方程中引入了冷能这一概念，它表示介质中由晶体分子之间的微观作用产生势能，该能量与温度无关，因此称为冷能。而受温度影响的部分，则为热内能^[1]。同时，与冷能相对应的压力，称为冷压。冷压可以通过实验以压力-体积的曲线形式反映出来，并且在相关实验中会设置特定的物理条件，如等熵条件，等温条件，绝热条件等。如爆轰产物的 JWL 状态方程，其冷压曲线就是基于等熵条件下的圆筒实验获得的^{[2][3]}。绝热条件则研究固液体材料受冲击时应用较多^[4]，绝热曲线有时也叫 Hugoniot 曲线^[5]。相比之下，等温曲线则应用较少，原因在于控制好等温线的同时难以满足高压条件^[1]。等温条件下多采用 Murnaghan 方程作为状态方程^[6]。由于冷压和冷能常按特定的标准进行设定，因此有时也叫“参考压力”和“参考内能”。

针对由 Mie-Grüneisen 状态方程下的多介质流场，Mie-Grüneisen 混合模型是一种便捷高效的计算模型。该方法最早由薛克明^[7]提出，将流场视为一个整体，并通过特定的函数来区分不同流体，如体积分数、质量分数，或者其他的热力学参数等。它可以不依靠其他的界面追踪或界面重构技术，完成流场界面的处理。但由于其方程结构特性存在较强的非守恒性^[8]，它在数值算法领域受关注程度较低。柏劲松^[9]等人早期也借助该模型来完成流场的计算，并利用体积分数自动完成了界面位置的捕捉。G.M.Ward^[10]在 Mie-Grüneisen 混合模型中加入了压缩条件的数值限制器，并另外考虑密度偏小时的膨胀冷压特性，这样使得 Mie-Grüneisen 混合模型在界面处更符合平滑过渡的物理特性。

但是，传统的 Mie-Grüneisen 混合模型利用体积分数处理界面的模式，将流场中各介质的密度等同于流场整体的密度。而在界面附近，各介质以小于 1 的比例混合在一起，界面在模型中被考虑成扩散形态，而体积分数的使用会使介质的体积分数在由 1 变成 0 的扩散界面附近产生零碎的流体体积。由于 Mie-Grüneisen 状态方程基于不同的参考压力及内能来建立，并且参考压力曲线往往随着体积减小而变大，遇上零碎的流体体积容易出现很大的斜率，甚至出现奇点。对于 Mie-Grüneisen 混合模型来说，当参考压力或参考内能曲线的斜率过大会通过热力学特性影响到声速。如斜率为很大的负值，容易出现声速小于 0 的情况；如斜率为很大的正值，则通过声速影响到收敛性条件。但是计算准确度基本不受到影响，因此声速受到的影响容易被忽略。在过去的工作中^{[11][12]}，曾经关注过这

一现象，并改用质量分数来处理，对流场中各介质的密度单独考虑，并且它们的和为流场整体的密度。但过去的工作中没有对特定的参考压力曲线进行展开分析与讨论。

本文对 Mie-Grüneisen 混合模型中两种典型的参考状态曲线进行分析，并特别关注了参考压力曲线中出现奇点的情况。为了避免出现零碎的流体体积，采用了质量分数模型来替换体积分模型，由于质量分数模型中各流体介质体积都被看作是流体整体的体积，因此不会出现零碎的流体体积。利用质量分数下的 Mie-Grüneisen 混合模型，处理了典型状态方程下的界面问题，并通过界面附近的声速优化对收敛性条件进行改善。同时，对于计算中出现的流体介质声速小于 0 的不合理情况，进行了数值处理。

1 基本方程

1.1 计算模型

对于多介质的可压缩流场，其运动满足守恒形式的欧拉方程：

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) = 0 \\ \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 + p) = 0 \\ \frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho E u + p u) = 0 \end{cases} \quad (1)$$

此处 ρ 、 p 、 u 、 E 分别密度，压力，速度和单位体积能量。单位体积的总能量为内能 e 和动能的总和，并且有： $E=e+u^2/2$ 。欧拉方程(1)需要结合状态方程，才能完成求解。对状态方程，选用通用性强的 Mie-Grüneisen 方程的形式：

$$p - p_{\text{ref}}(V) = \rho \Gamma(V)(e - e_{\text{ref}}(V)) \quad (2)$$

这里， V 代表比容，且有 $V=1/\rho$ 。将(1)和(2)联立在一起，即可完成流场的求解。(2)式中： Γ 为 Grüneisen 系数， p_{ref} 和 e_{ref} 为参考状态的压力和单位体积内能。当 p_{ref} 和 e_{ref} 的表达式较为复杂的时候，直接联立(1)和(2)计算较为复杂，此时若对 Γ 、 p_{ref} 和 e_{ref} 构建自变量，并用体积分数 Z_i 来捕捉界面，则能为计算带来便利，这样整个求解方程组为：

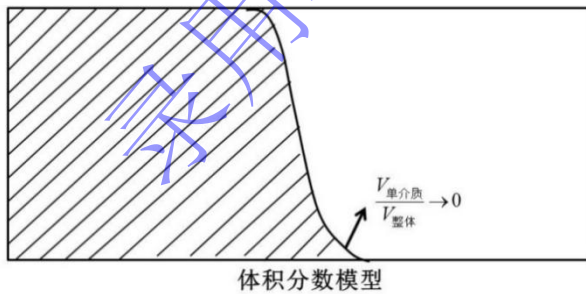


图1 体积分模型中 V 的特性

Fig.1 The property of V in volume fraction model

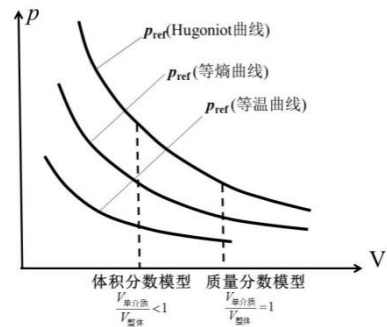


图2 p_{ref} 曲线的类型

Fig.2 Types of different p_{ref} curves

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) = 0 \\ \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 + p) = 0 \\ \frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho E u + p u) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{\Gamma}\right) + u \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\Gamma}\right) + \rho \phi \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{p_{\text{ref}}}{\Gamma}\right) + u \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{p_{\text{ref}}}{\Gamma}\right) + \rho \phi \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho e_{\text{ref}}) + u \frac{\partial}{\partial x}(\rho e_{\text{ref}}) + \rho \psi \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial Z_i}{\partial t} + u \frac{\partial Z_i}{\partial x} = 0 \quad (i = 1, 2, 3, \dots, m-1) \end{cases} \quad (3)$$

方程组(3)为 Mie-Grüneisen 多介质混合模型, 在该计算模型中, ϕ 、 φ 、 ψ 为非守恒变量 $1/\Gamma$ 、 p_{ref}/Γ 、 ρe_{ref} 关于密度 ρ 的偏导数, m 代表流场中介质的数量, 体积分数 Z_i 用来捕捉界面, 很多时候被称为“色函数”, 可在有颜色的云图上用来区分不同介质的存在区域。而压力 p 则表达成以下形式:

$$p = \frac{p_{\text{ref}}/\Gamma + \left(\rho e - \rho e_{\text{ref}} + \frac{1}{2}\rho u^2\right)}{1/\Gamma} \quad (4)$$

在传统的混合模型中, 变量 $1/\Gamma$ 、 p_{ref}/Γ 和 ρe_{ref} 由体积分数加权而成:

$$\begin{cases} \Gamma = Z_1 \cdot \Gamma_1(\rho) + Z_2 \cdot \Gamma_2(\rho) + \dots \\ p_{\text{ref}} = Z_1 \cdot p_{\text{ref}1}(\rho) + Z_2 \cdot p_{\text{ref}2}(\rho) + \dots \\ e_{\text{ref}} = Z_1 \cdot e_{\text{ref}1}(\rho) + Z_2 \cdot e_{\text{ref}2}(\rho) + \dots \end{cases} \quad (5)$$

这里角标 $1, 2, \dots$ 代表介质种类。

需要注意的是, 在体积分数模型中, 界面附近需要经过一个过渡区, 在这个过渡区内体积分数 Z 由 1 平滑过渡到 0, 这种界面形式被称为“有限厚度”界面或“扩散”界面, 如图 1 所示。当体积分数由 1 降为 0 并被另一种体积分数取代时, 比容 V 也由稳定的 $1/\rho$ 逐渐降为 0。然而, 对于多介质混合问题, 容易产生零碎的流体体积, 它们以数值较小的 V 存在于这个过渡区域内。根据图 2 可知, 当流体体积特别小时, 会使得 p_{ref} 迅速增大, 并最终引起偏导数 ϕ 与 ψ 出现异常情况, 并最终影响到界面附近的数值计算。

1.2 声速计算及奇点

方程组(3)中, 声速的计算方式为:

$$c^2 = \frac{\partial p}{\partial \rho} + \frac{p}{\rho} \cdot \frac{\partial p}{\partial(\rho e)} = \left(\rho \frac{\Gamma'}{\Gamma} + 1 + \Gamma\right) \frac{p - p_{\text{ref}}}{\rho} + \Gamma \frac{p_{\text{ref}}}{\rho} + p'_{\text{ref}} - \Gamma \rho e'_{\text{ref}} \quad (6)$$

在(5)式中, 使用了流场的整体密度来计算热力学参数 Γ 、 p_{ref} 和 e_{ref} 。而参考状态参数 p_{ref} 和 e_{ref} 有多种选取方式, 但基本变化趋势为: 反映分子晶格间作用的冷压 p_{ref} , 随着压缩度增大 (V 减小) 而增大, 如图 2 所示。这里考虑两种典型的参考状态曲线: 等熵曲线和 Hugoniot 绝热曲线。

与文献[5]类似, 先考虑 Hugoniot 绝热曲线。在该曲线上, p_{ref} 和 e_{ref} 满足质量、动量及能量守恒条件^[4]:

$$\rho(u_s - u_p) = \rho_0 u_s \quad (7)$$

$$p_{\text{ref}} - p_0 = \rho_0 u_s u_p \quad (8)$$

$$e_{\text{ref}} = e_0 + \frac{1}{2}[p_{\text{ref}} + p_0](V_0 - V) \quad (9)$$

这里用 V 表示压缩后比容, 且有 $V=1/\rho$, $V_0=1/\rho_0$ 。 u_s 和 u_p 分别代表冲击波速度和波后质点速度。实验表明, 对于大多数材料, 有^[4]:

$$u_s = c_0 + s \cdot u_p \quad (10)$$

c_0 为介质正常状态下的声速, s 为通过实验拟合的 Hugoniot 系数, 它的数值通常在 1.0 到 1.6 之间^[13]。根据(7)、(8)和(10), 可以得出的参考压力 p_{ref} 的表达式:

$$p_{\text{ref}} = p_0 + c_0^2 \frac{V_0 - V}{[V_0 - s(V_0 - V)]^2} \quad (11)$$

而参数 Γ 的定义方式为^[7]:

$$\Gamma = \Gamma_0 \left(\frac{V}{V_0} \right)^\alpha \quad (12)$$

其中 α 为无因次的体积修正系数。

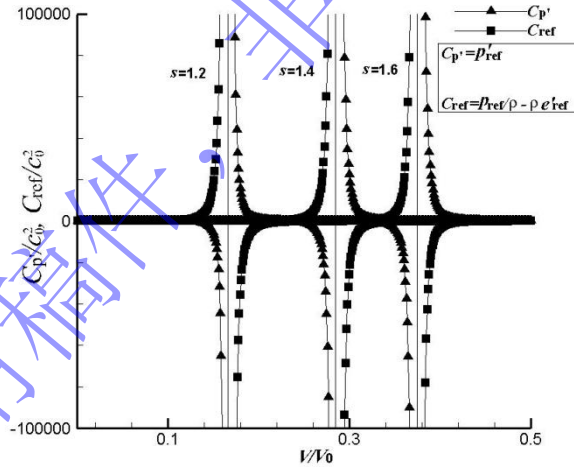


图3 不同 s 值, $C_{p'}$ 与 C_{ref} 变化曲线

Fig.3 The curves of $C_{p'}$ and C_{ref} for different values of s 在声速表达式(6)中, 定义 $C_{p'} = p'_{\text{ref}}$ 。这样:

$$C_{p'} = p'_{\text{ref}} = c_0^2 \frac{V_0 + s(V_0 - V)}{[V_0 - s(V_0 - V)]^3} \cdot V^2 \quad (13)$$

同时定义 $C_{\text{ref}} = p_{\text{ref}}/\rho - \rho e'_{\text{ref}}$, 并且有:

$$C_{\text{ref}} = \frac{p_{\text{ref}}}{\rho} - \rho e'_{\text{ref}} = -c_0^2 \frac{s(V_0 - V)^2}{[V_0 - s(V_0 - V)]^3} \cdot V \quad (14)$$

对于压缩状态的介质，体积变小， $V < V_0$ 。将 C_p 与 C_{ref} 绘制成关于压缩后比容与初始比容的比值 V/V_0 ，可以得到如图 3 所示的相关曲线。从图 3 可以发现， C_p 与 C_{ref} 的曲线都存在奇点，在奇点附近，它们的数值存在较大波动。考虑它们出现在声速平方项中：

$$c^2 = \left(\rho \frac{\Gamma'}{\Gamma} + 1 + \Gamma \right) \frac{p - p_{ref}}{\rho} + \Gamma C_{ref} + C_p' \quad (15)$$

因此， C_p 与 C_{ref} 中任何一个出现奇点都容易引起 c^2 值为负数，并导致后续计算难以进行。由图 3 中可以注意到，由于奇点分布在 0.1~0.5 范围内(具体位置根据 s 而确定)，当 V/V_0 的数值在 0 和 1 之间变化时(即压缩状态)，非常容易触发奇点而直接影响到 c^2 的计算。

再考虑另一种等熵曲线做参考压力 p_{ref} 的情况。在等熵条件下，物质的熵 S 与温度 T 满足如下关系：

$$de_{ref} = TdS - p_{ref}dV \quad (16)$$

考虑到等熵曲线中， $dS=0$ 。那么有：

$$p'_{ref} = -\frac{de_{ref}}{dV} = \frac{1}{\rho^2} e'_{ref} \quad (17)$$

代入声速计算公式(6)，有

$$c^2 = \left(\Gamma + 1 + \rho \frac{\Gamma'}{\Gamma} \right) \frac{p - p_{ref}}{\rho} + p'_{ref} \quad (18)$$

公式(18)中， p_{ref} 作为非线性曲线，在不同的等熵条件下有着多种形式。如爆轰问题中，使用圆筒实验得到了指数形式的曲线^[2]，并最终拟合成熟知的 JWL 曲线。需要注意的是，当压缩度越大， V 越小，曲线会变得陡峭， p_{ref} 的导数也随之变大。在接近 0 的位置，也是往往容易出现奇点。

2 数学模型优化

2.1 质量分数模型

考虑到体积分数模型容易在界面附近产生零碎的比容 V ，并容易产生奇点。这里将体积分数 Z 替换为质量分数 Y ，这样可以在整个计算过程中将流场视为不同密度的流体混合物，从而避免产生零碎的体积。且流场中介质的密度也可以作为色函数来捕捉界面，这样系统方程组(3)的最后一个方程可以替换为：

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho Y_i u)}{\partial x} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, m-1) \quad (19)$$

在公式(19)中，对流场中第 i 介质的比容 V_i ，有如下计算：

$$V_i = \frac{1}{\rho Y_i} \geq V \quad (20)$$

由于奇点往往出现在比容较小时，因此质量分数模型能通过扩大比容参数 V_i 来避免奇点的产生。而系统计算方程组(3)中的偏导数 ϕ 、 φ 、 ψ ，则按照质量分数 Y 来展开：

$$\begin{cases} \phi = Y_1 \left(-\frac{\Gamma_1'}{\Gamma_1^2} \right) \Big|_{\rho Y_1} + Y_2 \left(-\frac{\Gamma_2'}{\Gamma_2^2} \right) \Big|_{\rho Y_2} + \dots \\ \varphi = Y_1 \left(\frac{\Gamma_1 p'_{\text{ref}1} - p_{\text{ref}1} \Gamma_1'}{\Gamma_1^2} \right) \Big|_{\rho Y_1} + Y_2 \left(\frac{\Gamma_2 p'_{\text{ref}2} - p_{\text{ref}2} \Gamma_2'}{\Gamma_2^2} \right) \Big|_{\rho Y_2} + \dots \\ \psi = Y_1 (\rho_1 e'_{\text{ref}1} + e_{\text{ref}1}) \Big|_{\rho Y_1} + Y_2 (\rho_2 e'_{\text{ref}2} + e_{\text{ref}2}) \Big|_{\rho Y_2} + \dots \end{cases} \quad (21)$$

2.2 声速计算及优化

声速计算，我们使用(6)的计算方式。对于多介质模型，我们进行如下的考虑：

$$dp = \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right) \Big|_{\rho Y_i} d(\rho Y_i) + \sum_{i=1}^m \frac{\partial p}{\partial (\rho e)} \Big|_{\rho Y_i} d(\rho e) = \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right) \Big|_{\rho Y_i} (Y_i d\rho + \rho dY_i) + \sum_{i=1}^m \Gamma_i \Big|_{\rho Y_i} d(\rho e)$$

式子两边同时除以 dp 和 $d(\rho e)$ ，可以分别得到：

$$\frac{dp}{d\rho} = \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right) \Big|_{\rho Y_i} Y_i d\rho, \quad \frac{dp}{d(\rho e)} = \sum_{i=1}^m \Gamma_i \Big|_{\rho Y_i} \quad (22)$$

将(22)代入到(6)中，可以通过加权得到总声速：

$$c^2 = \frac{\partial p}{\partial \rho} + \frac{p}{\rho} \cdot \frac{\partial p}{\partial (\rho e)} = Y_1 c_1^2 + Y_2 c_2^2 + \dots \quad (23)$$

需要注意的是，在界面附近各介质以不同的 Y 混合时，对于参考状态参数 p'_{ref} 和 e'_{ref} ，不应当简单地对密度 ρ 进行求导。否则，当两介质的密度跳跃很大时，依旧容易出现误差并影响到声速。严重情况下会使得声速为负值。为此，在进行如(23)的加权时，对单介质中的参考状态 p'_{ref} 和 e'_{ref} 进行如下修正：

$$\begin{cases} p'_{\text{ref}} = Y_1 \cdot p'_{\text{ref}1}(\rho_1) + Y_2 \cdot p'_{\text{ref}2}(\rho_2) + \dots \\ e'_{\text{ref}} = Y_1 \cdot e'_{\text{ref}1}(\rho_1) + Y_2 \cdot e'_{\text{ref}2}(\rho_2) + \dots \end{cases} \quad (24)$$

以 p_{ref} 为例，证明如下：

$$dp_{\text{ref}} = \sum_{i=1}^m p'_{\text{ref}i} \Big|_{\rho Y_i} d(\rho Y_i) = \sum_{i=1}^m p'_{\text{ref}i} \Big|_{\rho Y_i} (Y_i d\rho + \rho dY_i)$$

对于不同的介质， p_{ref} 的表达式不同，这里用 $p_{\text{ref}i}$ 进行区分。这样，可以得到：

$$\frac{dp_{\text{ref}}}{d\rho} = \sum_{i=1}^m Y_i p'_{\text{ref}i} \Big|_{\rho Y_i} = \sum_{i=1}^m Y_i p'_{\text{ref}i} \Big|_{\rho_i}$$

展开后即表达式(24)。同理可证 e_{ref} 。修正表达式(24)的物理意义为：为界面处设置一个相对稳定的平滑过渡的参考状态($p_{\text{ref}}, e_{\text{ref}}$)，避免因为密度间断和状态方程形式的突变影响到计算。

2.3 声速收敛条件

数值计算中的时间步长 Δt ，需要由左侧波面与右侧波面的最大运动速度来定义。在定义空间步长时，一般要求波面在 Δt 时间内的运动距离不得超过步长 Δx 。根据这一收敛性要求，对 Δt 的定义为^[10]：

$$\Delta t = C_{\text{CFL}} \frac{\min(\Delta x)}{\max(|u_i| + c_i)} \quad (25)$$

这里 u_i 和 c_i 表示第 i 个网格点的质点速度和声速。 C_{CFL} 是一个 0~1 之间的系数，满足收敛的条件为： $C_{\text{CFL}} < 1$ 。分母中的参数 $|u|+c$ 用来表示左侧和右侧激波(数值分别为 $u-c$ 和 $u+c$)中的最大值。

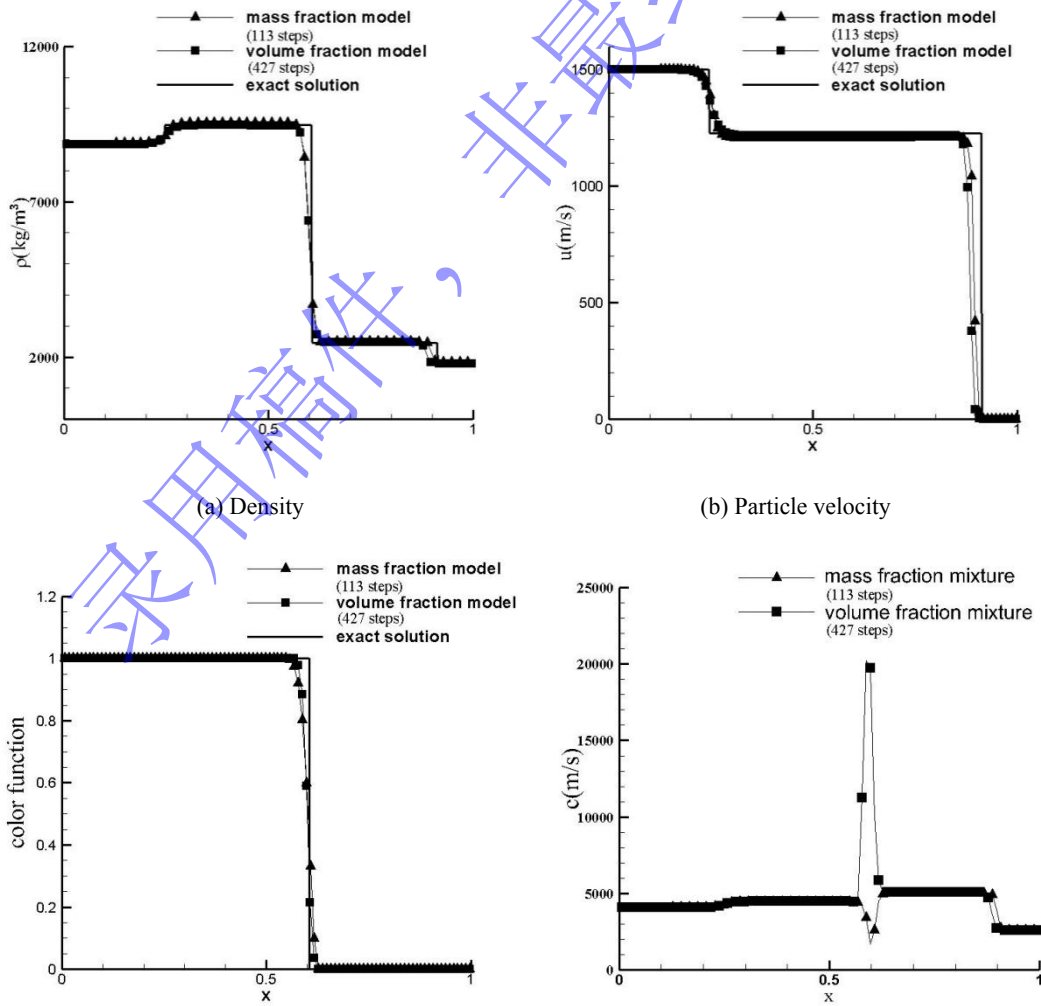
由(25)可知，在整个计算域内如果某处出现奇点，有可能会拉高 $|u|+c$ 的最大值并最终影响整个时间步长，进而影响到整个计算域的计算效率。

3 数值算例

3.1 等熵 CC 方程下的双介质问题

这里先考虑一个 Saurel 和 Abgrall 早期研究中的高速冲击问题^[14]。初始时刻，界面的左侧是高速运动的铜介质，右侧为惰性炸药。两种介质的状态方程均为 CC(Cochran-Chan)方程^[15]，其表达式为：

$$\begin{cases} \Gamma = \Gamma_0, p_{\text{ref}} = A \left(\frac{V}{V_0}\right)^{-\varepsilon_1} - B \left(\frac{V}{V_0}\right)^{-\varepsilon_2}, \\ e_{\text{ref}} = -\frac{A}{\rho_0(1-\varepsilon_1)} \left[\left(\frac{V}{V_0}\right)^{1-\varepsilon_1} - 1\right] + \frac{B}{\rho_0(1-\varepsilon_2)} \left[\left(\frac{V}{V_0}\right)^{1-\varepsilon_2} - 1\right] \end{cases} \quad (26)$$



(c) Color function

(d) Sound velocity

图4 铜-惰性炸药冲击问题, 73μs 计算结果

Fig.4 The results of 73μs for copper-inert explosive impact problem.

CC 状态方程主要用于描述炸药的起爆过程, 因而参考压力 p_{ref} 随体积变化剧烈。初始时刻两侧介质的物理状态与状态方程参数为:

- $x < 0.5$: $\rho_0 = \rho = 8900 \text{ kg/m}^3$, $p = 1 \text{ atm}$, $u = 1500 \text{ m/s}$, $A = 145.67 \text{ Gpa}$, $B = 147.75 \text{ Gpa}$, $\varepsilon_1 = 2.99$, $\varepsilon_2 = 1.99$, $\Gamma_0 = 2.0$
- $x > 0.5$: $\rho_0 = \rho = 1840 \text{ kg/m}^3$, $p = 1 \text{ atm}$, $u = 0 \text{ m/s}$, $A = 12.87 \text{ Gpa}$, $B = 13.42 \text{ Gpa}$, $\varepsilon_1 = 4.1$, $\varepsilon_2 = 3.1$, $\Gamma_0 = 0.93$

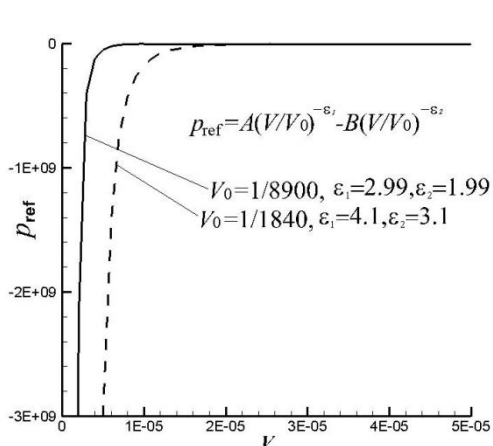


图5 惰性炸药 CC 方程的 p_{ref} 曲线

Fig.5 The p_{ref} curve of CC equation for inert explosive

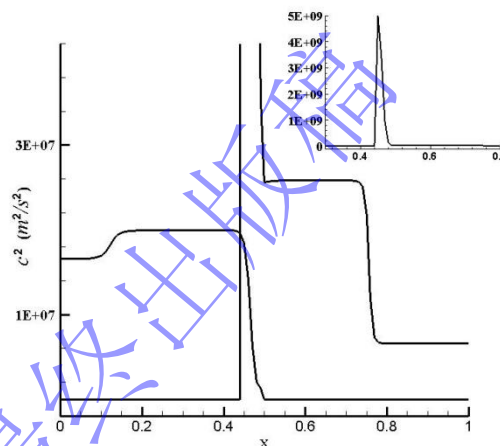
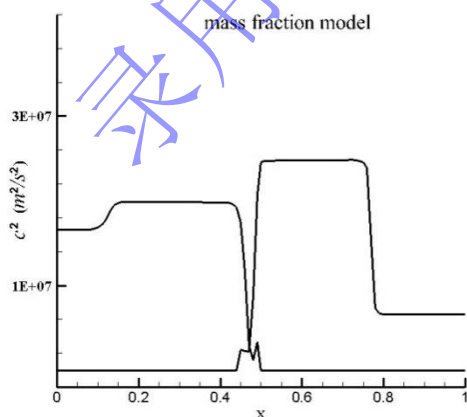


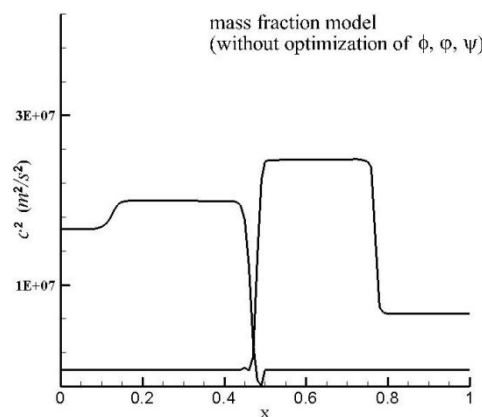
图6 体积分数模型, 介质声速变化

Fig.6 The variation of sound velocities for volume fraction model

该算例中, 采用了体积分数和质量分数两种不同的模型来计算, 计算结果如图4所示。通过对比两种模型的计算结果可以发现, 无论使用体积分数还是质量分数, 密度 ρ 、质点速度 u 等物理状态差别不大, 利用质量分数得到的右侧冲击波波面位置, 略好于体积分数(见图4(a)和(b))。而两者利用色函数捕捉的界面位置则非常接近(见图4(c))。但是使用体积分数时, 由于奇点的影响, 大幅度拉高了声速 c^2 数值。而声速升高后, 依照收敛性条件(25), 需要缩短时间步以维持收敛性, 这样花费更多的时间步来。因而在计算效率上, 使用质量分数要明显优于体积分数。



(a) With optimization



(b) Without optimization

图7 质量分数模型中, 介质声速变化

Fig.7 The variation of sound velocities for mass fraction model.

需要注意的是，这里两种介质使用的 CC 状态方程基于等熵曲线，并且存在奇点。图 5 给出了 p_{ref} 曲线随比容 V 的变化情况。图中可以很明显地发现，两个状态方程都在接近 0 的位置出现奇点，由于 p_{ref} 曲线为 V/V_0 幂函数，这样当 V 接近 0 时即出现分母接近 0 的情况，此时导数 p'_{ref} 也接近无穷大。根据公式(18)可知，声速也将受到极大影响。但是如选用质量分数，则在一定程度上可以避免出现很小的数值 V ，从而对奇点起到一定的抑制作用。

图 6 和图 7 对两种模型分别给出了声速平方变化曲线。在图 6 体积分数模型中，由于各介质按不同的比容 V 进行混合，不可避免地在界面附近出现 V 由大到小的数值过渡并产生零碎的体积 V 。当界面位置零碎体积 V 非常小时，结合 CC 状态方程的特殊性可知， V 在接近 0 时即产生奇点， p'_{ref} 趋于无穷大，并导致声速也趋于无穷大。另外，在体积分数的计算结果中，奇点在右侧的铜介质中呈现出特别明显的效果，这是因为右侧介质比容 V_0 较大，结合图 5 中曲线可发现，右侧介质的状态方程表达式对奇点更为敏感。图 7 给出的质量分数模型下，则出现声速比较平稳的现象。采用质量分数后，由于单个介质的声速受到体积值 V_i 放大的影响，到了界面处声速大幅度减弱。这样，两种介质的界面处，声速会形成一个低谷。但是处理不当时，单个介质会出现声速为负值的情况，此时可利用(24)式进行修正，修正后即可将声速从负值调整为正值。

3.2 等熵 JWL 状态方程与 Hugoniot 曲线 Mie-Grüneisen 方程下的双介质问题

本算例为爆轰气态产物与水的冲击问题。初始时刻，界面的左侧是气态爆轰产物，右侧是水介质。爆轰气体和水的状态方程分别为 JWL 状态方程和 CC 方程。爆轰气态物初始物理量定义为 C-J 状态^[1]：

$$\rho_{CJ} = \frac{\gamma_j + 1}{\gamma_j} \rho_0, u_{CJ} = \frac{1}{\gamma_j + 1} D_j, p_{CJ} = \frac{1}{\gamma_j + 1} \rho_0 D_j^2 \quad (27)$$

这里 ρ_0 为初始密度， D_j 为冲击波速度， γ_j 为热力学系数，它们的具体数值为： $\rho_0=1630\text{kg/m}^3$ ， $D_j=6950\text{m/s}$ ， $\gamma_j=2.727$ 。状态方程为 JWL 方程，转换成 Mie-Grüneisen 状态方程表达式如下：

$$\text{JWL方程:} \begin{cases} \Gamma = \omega, p_{\text{ref}} = A \exp\left(-R_1 \frac{V}{V_0}\right) + B \exp\left(-R_2 \frac{V}{V_0}\right) \\ e_{\text{ref}} = \frac{A}{\rho_0 R_1} \exp\left(-R_1 \frac{V}{V_0}\right) + \frac{B}{\rho_0 R_2} \exp\left(-R_2 \frac{V}{V_0}\right), V = \frac{1}{\rho}, V_0 = \frac{1}{\rho_0} \end{cases} \quad (28)$$

对于水，采用(11)和(9)作为 Hugoniot 曲线下的 Mie-Grüneisen 状态方程。两者的状态方程参数为^[1]：

- 爆轰产物: $A=373.8\text{Gpa}$, $B=3.75\text{Gpa}$, $R_1=4.6$, $R_2=1.35$, $\omega=0.25$
- 水: $\rho_0=\rho=1000\text{kg/m}^3$, $c_0=1700\text{m/s}$, $s=1.7$, $\Gamma_0=2.0$, $\alpha=1.0 \times 10^{-4}$

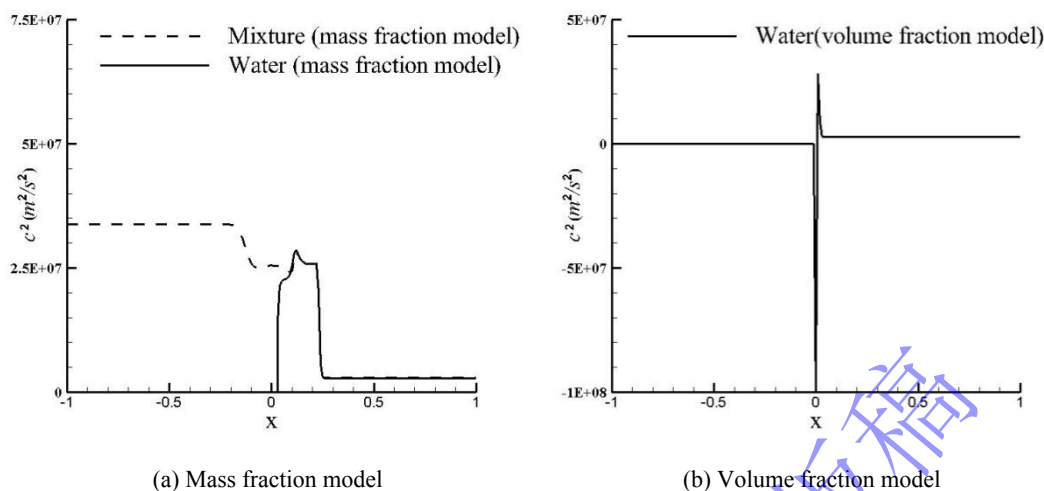
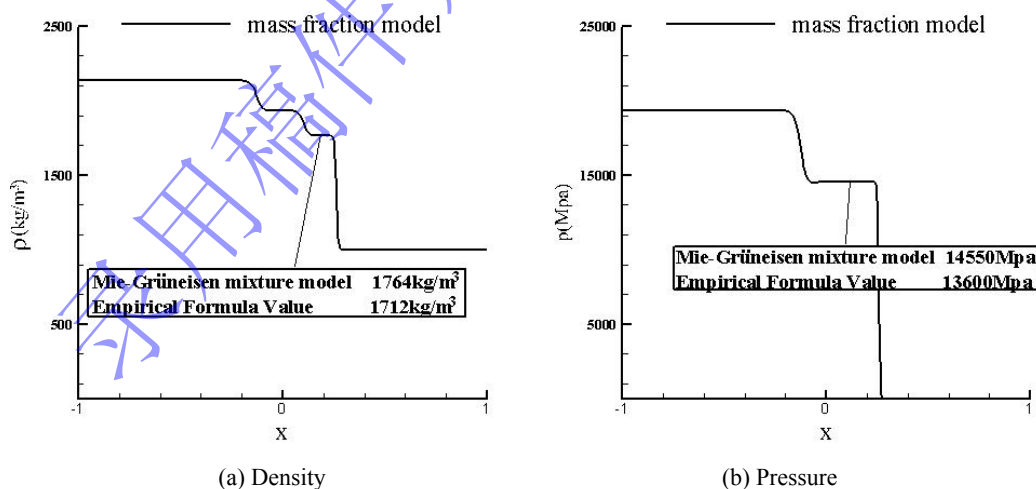


图 8 CJ 态爆轰气体冲击问题中介质声速变化

Fig.8 The variation of sound velocities for detonation impact problem of CJ states.

该问题中，Hugoniot 曲线下的 Mie-Grüneisen 状态方程由于奇点原因，计算声速平方项时，容易出现小于 0 的情况。采用体积分数模型和质量分数模型计算时，声速的计算结果如图 8 所示。图 8(a)为质量分数模型的计算结果，声速的计算出现了一定的波动，这是因为质量分数中对参考状态的优化表达式(24)与正常模型的参考状态在界面处出现了微弱的不匹配。但是流场整体的 c^2 未受到奇点的影响，计算仍然可以正常进行。而体积分数模型中，一开始即出现声速为负数的情况，导致计算无法进行。本算例中的体积分数模型，发生奇点的位置，水的体积分数约为 0.72，按声速公式(6)计算得到参数 $C_p=1.15 \times 10^{10}$ ， $C_{ref}=-6.6 \times 10^9$ 。由于奇点处 C_p 和 C_{ref} 数值波动极大，难以准确表达 c^2 曲线的变化。需要注意的是，由于左侧介质为 JWL 方程，其等熵 p_{ref} 曲线为指数形式的曲线。由于该曲线的表达式不存在奇点，因此在计算声速时也不会产生奇点。



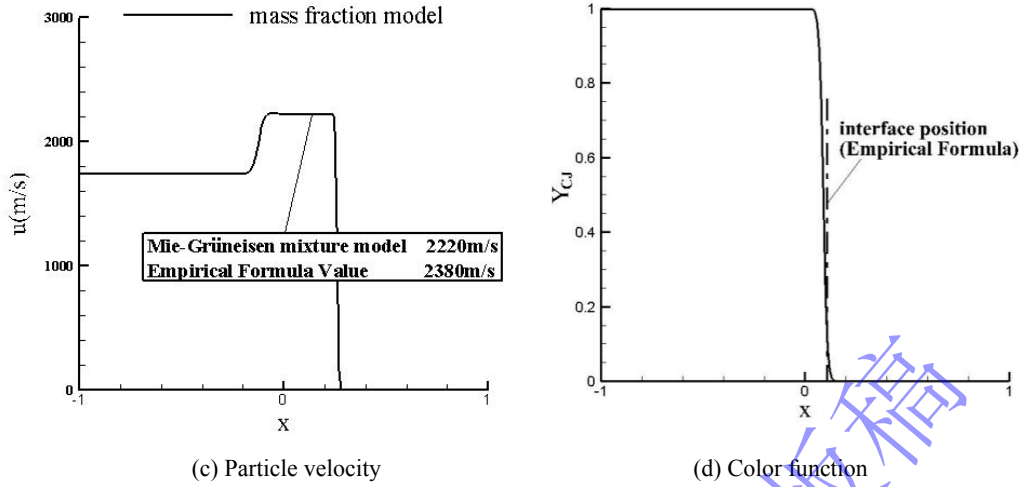


图9 CJ态爆轰气体冲击问题, 45 μ s时的计算结果
Fig.9 The results of 45 μ s for detonation impact problem of CJ states.

图9为利用质量分数模型得到的计算结果。在计算结果中，CJ态爆轰气体冲击水产生的冲击波面清晰，且冲击波参数稳定。这里假设冲击波在水中的密度、压力与质点速度分别为 ρ_m 、 p_m 、 u_m (为了强调介质，将角标统一换成了m)。其中 p_m 与 u_m 在界面处保持平衡无间断，而 ρ_m 则在界面处有一断面。为了验证计算结果的准确性，这里利用爆轰物理学中近似的经验公式来估算它们的数值^[1]：

$$\begin{cases} p_m = \rho_m u_s u_m \\ u_m = \frac{u_s}{\gamma_j + 1} \left[1 + \frac{2\gamma_j}{\gamma_j - 1} \left(1 - (p_m/p_{CJ})^{\frac{\gamma_j - 1}{2\gamma_j}} \right) \right] \\ u_m = \sqrt{(p_m - p_0)(V_0 - V_m)} \\ V_0 = 1/\rho_0, V_m = 1/\rho_m \end{cases} \quad (29)$$

利用(29)得到的冲击波参数，整体上与本文中的计算结果较为接近。这证明 Mie-Grüneisen 混合模型得到的计算结果具备一定的可靠性。然而，由于本算例中的 CJ 爆轰气体具备高压力和高爆速的特点，使得冲击波计算的难度偏大，因而本文得到的冲击波质点速度与压力，与经验公式提供的数值仍然存在着较小的差距。

3.3 Mie-Grüneisen 状态方程更新后双介质问题

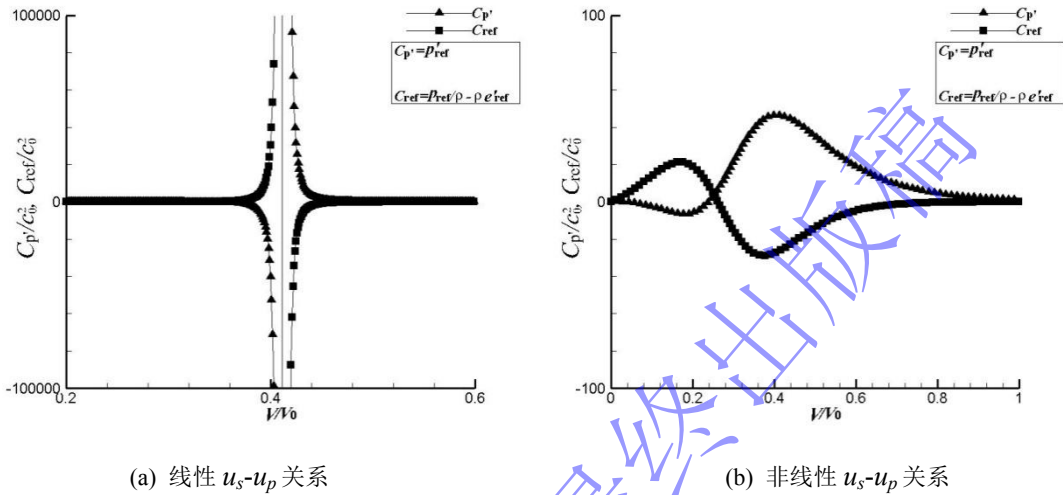
在上一算例中，由于 Mie-Grüneisen 状态方程在体积分数模型的应用上出现了一定的问题，我们对其形式进行了一定的改进。改进后，表达式由公式(10)的线性形式，更换为非线性形式：

$$u_p = c_0 + s_1 u_s - s_2 \left(\frac{u_s}{u_p} \right) u_s + s_3 \left(\frac{u_s}{u_p} \right)^2 u_s \quad (30)$$

c_0 为初始状态下的声速，其数值为 1480m/s， s_1 ， s_2 ， s_3 为根据实验得到的参数。 $s_1=2.56$ ， $s_2=-1.986$ ， $s_3=0.227$ 。更换后，状态方程的形式变得复杂，其具体表达式为：

$$p = (\gamma_0 + \alpha\mu)\rho e + \begin{cases} \frac{\rho_0 c_0^2 \mu [1 + (1 - \gamma_0/2)\mu - \alpha\mu^2/2]}{1 - (s_1 - 1)\mu - s_2 \frac{\mu^2}{\mu + 1} - s_3 \frac{\mu^3}{(\mu + 1)^2}}, & \mu > 0 \\ \rho c_0^2 \mu, & \mu < 0 \end{cases} \quad (31)$$

α 为体积修正系数，这里取 0。

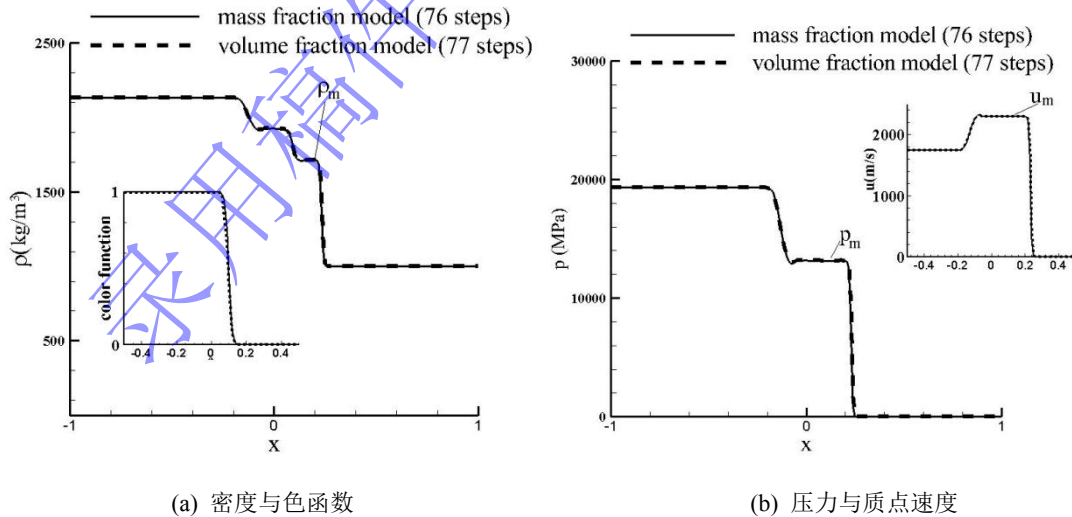


(a) 线性 u_s-u_p 关系 (b) 非线性 u_s-u_p 关系

图 10 两种 Mie-Grüneisen 状态方程下, C_p 与 C_{ref} 变化曲线

Fig.10 The curves of C_p and C_{ref} for different Mie-Grüneisen equation of states

原 Mie-Grüneisen 状态方程由于在表达式上会产生奇点，因而无法用体积分数模型计算。换用状态方程后，奇点位置被连续的曲线所代替，如图 10 所示。这样，原线性表达式中奇点被取消后，声速计算对质量分数模型和体积分数模型都不存在障碍，数值计算也都能正常进行。



(a) 密度与色函数 (b) 压力与质点速度

图 11 算例 2 转换状态方程后，两种模型的的计算结果

Fig.11 The results of the two models after a transformation of equations of states in Example 2.

两个模型的计算结果在图 11 中给出。从图中可以发现，修改后的状态方程，由于不存在奇点，用体积分数和质点速度得到的结果几乎一样。图 11 中两个模型得到的冲击波参数为：

$\rho_m=1715\text{kg/m}^3$ 、 $p_m=13410\text{kg/m}^3$ 、 $u_m=2316\text{m/s}$ 。与算例 2 的图 9 中的计算结果相比, 图 11 的冲击波参数更为接近经验公式解。然而, 由于状态方程(31)的形式复杂, 稳定性不如线性 u_s-u_p 关系下状态方程, 在界面和左侧稀疏波附近出现了微弱的数值波动。另外, 缺少奇点影响后, 在同样的收敛条件下时间步长也十分接近。质量分数模型由于优化了零碎的流体体积, 时间步略有变长, 计算效率有微小幅度的加快。

4 结论

等熵曲线和 Hugoniot 绝热曲线为 Mie-Grüneisen 状态方程中常用的两种典型曲线。本文针对这两种 Mie-Grüneisen 状态方程中的奇点问题展开研究, 着重分析了奇点对多介质 Mie-Grüneisen 混合模型的影响, 并应用质量分数来代替体积分数来处理奇点所引起的问题。在这个过程中, 得到以下结论:

(1) 等熵曲线下的 Mie-Grüneisen 状态方程, 一般随着流体体积减小而出现参考压力和内能大幅度上升的情况。这种情况下, 部分存在奇点的状态方程会在体积分数模型中产生界面附近的零碎小体积, 这些小体积因数值接近于 0 而使得声速大幅度提高, 并通过收敛性条件影响到时间步长。这样, 计算的时间步长变小, 而计算所消耗的时间步会大幅度增加, 降低计算效率;

(2) Hugoniot 绝热曲线为 Mie-Grüneisen 状态方程, 如使用线性的冲击波速度与波后质点速度关系式, 也会使得参考压力曲线中出现奇点。该奇点出现的位置与有关状态方程的参数有关, 并同样会受体积分数模型中界面附近的零碎小体积影响, 在严重甚至导致声速为负值。但是, 如果换用非线性的冲击波速度与质点速度关系式来构建 Mie-Grüneisen 状态方程, 可避免奇点产生;

(3) 基于质量分数的多介质 Mie-Grüneisen 混合模型下, 其模型特性为流体介质体积等于流体整体体积但保留各流体成分自身的流体密度。质量分数替换体积分数后, 完全不影响计算结果, 但是质量分数下的混合模型采用了介质密度的倒数作为比容, 数值大于正常流体的比容, 因而在界面处不会产生零碎小体积, 在一定程度上可消除奇点的影响;

(4) 使用基于质量分数的 Mie-Grüneisen 混合模型后, 声速在界面位置处出现下凹趋势。对于某些密度间断强并且状态方程差别大的多介质问题, 该下凹趋势可导致声速降为 0 以下。为此, 可以通过对参考状态优化来保证声速为正值。优化内容主要是通过界面处对 Mie-Grüneisen 方程中参考状态参数及其偏导数建立一个数值过渡, 以保证计算的稳定进行;

(5) 对于带奇点的等熵曲线与 Hugoniot 绝热曲线下的 Mie-Grüneisen 状态方程, 质量分数模型都可以保证计算顺利完成, 且计算结果具备较好的准确性。但是, 如果 Hugoniot 绝热曲线采用了非线性的冲击波速度与质点速度关系式, 并将压缩和膨胀状态分开来考虑时, 会影响状态方程连贯性, 并在界面附近出现轻微振荡。

参考文献

- [1] 张宝铨, 张庆民, 黄风雷. 爆炸物理学[M]. 2006 年 3 月第 1 版. 北京市: 北京理工大学出版社, 2001
- [2] Lee E, Finger M, Collins W. JWLEquation of state coefficients for high explosives, UCID-16189[R]. Livermore: Lawrence Livermore National Laboratory, 1973
- [3] 焦俊杰, 单锋, 王晗程, 等. 基于水下爆炸的爆轰产物 JWLEquation of state 确定方法研究[J]. 爆炸与冲击, 2025, x(x): DOI: 10.11883/bzycj-2024-0203
Jiao Junjie, Shan Feng, Wang hancheng, et al. Determination of JWLEquation of state based on the detonation product form underwater explosion[J]. Explosion and Shock Waves, 2025, x(x): DOI: 10.11883/bzycj-2024-0203

- [4] Miller G H, Puckett E G. A High-order Godunov method for multiple condensed phases [J]. Journal of Computational Physics. 1996, 128(1): 134-164.
- [5] 刘益儒, 胡晓棉. 一种基于 Hugoniot 关系的爆轰产物等熵状态方程[J]. 爆炸与冲击, 2018, 38(1): 60-65. DOI: 10.11883/bzycj-2016-0132
Liu Yiru, Hu Xiaomian. An isentropic equation of state of detonation product based on a Hugoniot relationship of detonation product[J]. Explosion and Shock Waves, 2018, 38(1): 60-65. DOI: 10.11883/bzycj-2016-0132
- [6] 张剑, 谢燕武, 潘跃武, 等. 铝的等温状态方程[J]. 高压物理学报, 2004, 18(1): 75-77
Zhang Jian, XIE Yanyu, PAN Yuewu, et al. Isothermal Equation of State of Aluminium[J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2004, 18(1):75-77. DOI: 10.11858/gywlxb.2004.01.013
- [7] Shyue K M. A fluid-mixture type algorithm for compressible multicomponent flow with Mie-Grüneisen equation of state[J]. Journal of Computational Physics, 2001, 171(2): 678-707. DOI: 10.1006/jcph.2001.6801
- [8] Z.D.Wu, L.Sun, Z.Zong. A mass fraction based interface capturing method for multi-component flow[J], International Journal for Numerical Methods in Fluids, 2013, 73(1): 74-102. DOI: 10.1002/fld.3805
- [9] 柏劲松, 陈森华, 李平, 等. 多介质可压缩流体动力学界面捕捉方法[J]. 爆炸与冲击, 2004, 24(1): 37-43
BO Jingsong, CHEN Senhua, LI Ping. Interface capturing method for compressible multi-fluid dynamics[J]. Explosion and Shock Waves, 2004, 24(1): 37-43
- [10] Ward G M, Pullin D I. A hybrid, center-difference, limiter method for simulations of compressible multicomponent flows with Mie-Grüneisen equation of state. Journal of Computational Physics 2010, 229(8), 2999-3018.
- [11] 吴宗铎, 赵勇, 严谨, 宗智. 球坐标系下多介质混合物模型的数值模拟[J]. 爆炸与冲击, 2019, 39(5): 054204. DOI: 10.11883/bzycj-2018-0075
WU Zongduo, ZHAO Yong, YAN Jin, ZONG Zhi, GAO Yun. Numerical simulation about the multi-component mixture model under spherical coordinate system[J]. Explosion and Shock Waves, 2019, 39(5): 054204. DOI: 10.11883/bzycj-2018-0075
- [12] 吴宗铎, 严谨, 宗智, 等. 扩散界面形式下一种节约时间步的质量分数混合模型[J]. 计算物理, 2022, 39(5): 510-520. DOI: 10.19565/j.cnki.1001-246x.8453
WU Zongduo, YAN Jin, ZHONG Zhi, et al. A Diffused Interface Type Mass Fraction Model with Time Steps Saving Mixture Rules[J]. Chinese Journal of Computational Physics, 2022, 39(5): 510-520. DOI: 10.19565/j.cnki.1001-246x.8453
- [13] Kerley G I. The Linear u_s-u_p relation in shock-wave physics, Publisher: Kerley technical services, 2006, VA 24522-0709. Appomattox: Kerley technical services, 2006.
- [14] R. Saurel, R. Abgrall. A multiphase Godunov method for compressible multifluid and multiphase flows[J]. Journal of Computational Physics, 1999, 150(2): 425-467. DOI: 10.1006/jcph.1999.6187
- [15] Cochran S G, Chan J. Shock initiation and detonation models in one and two dimensions. UCID-18024[R]. Livermore: Lawrence Livermore National Laboratory, 1979.

(责任编辑 爆炸与冲击)