

时刻追踪多介质界面运动的动网格方法

王兵*, 司海青

(南京航空航天大学 民航学院, 南京 210094)

摘要:在对可压缩多介质流动的数值模拟中,定义介质界面为一种内部边界,由网格的边组成,界面边两侧对应两种不同介质中的网格。通过求解 Riemann 问题追踪介质界面上网格节点的运动,同时采用局部重构的动网格技术处理介质界面的大变形问题,并将介质界面定义为网格变形边界,以防止该边界上网格体积为负。运用 HLLC 格式求解 ALE 方程组得到整个多介质流场的数值解。最后从几个多介质流模型的计算结果可以看出,本文的动网格方法是可行的,而且可以时刻追踪介质界面的运动状态。

关键词:可压缩多介质流;运动网格;网格局部重构;ALE 方程组;HLLC 格式

中图分类号:O35 **文献标识码:**A

1 引言

在很多工程问题中经常会遇到带有自由运动界面的互不相混合的多介质流。目前在对多介质流动的数值模拟中,有很多捕捉介质界面的方法,如 Level Set 方法^[1],VOF 方法^[2],混合物模型方法^[3]等。这些方法都有着共同点:它们都是在固定网格下进行的,介质界面处的热力学状态参数量如压力、密度、速度以及能量等等都是依靠多项式差分近似得到的,通过求解特殊的方程式来捕捉介质界面的位置。当介质界面遇到大密度比或大压力比的情况时(如强激波作用于水-气界面),如果不进行特殊处理,界面上的压力会出现非物理震荡^[4]。如 T. G. Liu 等^[5]将经典的 GFM 方法^[1]进行改造,先在介质界面附近求解 Riemann 问题,然后 Riemann 解运用到 GFM 方法中,使得介质界面上的压力震荡大幅度减弱,甚至看起来不出来。

本文尝试在运动网格上对可压缩多介质流进行数值模拟,定义介质界面由网格的边组成,该边两侧对应两种不同的介质并且可以自由运动,通过求解 ALE (Arbitrary Lagrangian-Eulerian) 方程组^[6],在介质界面上求解 Riemann 问题追踪界面的运动,同时采用网格局部重构技术处理介质界面的大幅度位移所导致的网格畸变问题。计算结果表明,本文的方法是可行的,而且可以时刻追踪介质界面的运动状态。

收稿日期:2008-03-31;修改稿收到日期:2009-10-23.

作者简介:王兵*(1979-),男,博士,讲师

(E-mail: evanwb@163.com).

2 ALE 控制方程组

对一个可变形的控制体,理想可压缩 ALE 方程组的积分形式如下:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{(t)} U dV + \int_{(t)} F dA = 0 \quad (1)$$

式中 (t) 是可变形控制体, (t) 是运动边界。流动状态矢量 U 和通量矢量 F 分别为

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho v \\ E \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} (\rho v - \dot{x}) \cdot n \\ (\rho v - \dot{x}) \cdot n v + p n \\ (\rho v - \dot{x}) \cdot n E + p v \cdot n \end{pmatrix} \quad (2)$$

式中 ρ, v, p 和 E 分别是密度、速度矢量、压力和单位质量总能, n 是控制体的可动边界 (t) 的单位外法向向量, \dot{x} 是 (t) 的移动速度。当 $\dot{x} = 0$ 时,式(1)和式(2)描述的是 Euler 守恒方程组;当 $\dot{x} = v$ 时,式(1)和式(2)则描述的是 Lagrange 守恒方程组。因此,对可自由运动的介质界面,其周围的控制体上求解的是 ALE 方程组,而对其他控制体,实际上求解的是 Euler 方程组。在这里,对一维情况,定义控制体为一条线段;对二维情况,控制体定义为一个三角形网格。

为了使 ALE 方程组封闭,引入刚性气体状态方程^[11] (Stiffened Gas Equation of State):

$$p = (\gamma - 1) \left[E - \frac{1}{2} \rho |v|^2 - P \right] - P \quad (3)$$

式中 P 是一个扩展压力常数,是比热比,对空气, $\gamma = 1.4, P = 0$;对水, $\gamma = 7.0, P = 3.03975 E +$

08 Pa。声速 c 的计算公式为

$$c^2 = \frac{p + P}{\rho} \quad (4)$$

3 数值处理方法

3.1 ALE 方程组的数值离散

将方程组(1) 写成控制体格心型的 Runge-Kutta 四阶形式:

$$\begin{aligned} U^{(0)} &= U^n \\ U^{(k)} &= \frac{1}{n+1} [nU^{(0)} + k tR^{(k-1)}] \\ R^{(k)} &= R[U^{(k)}] = - \sum_{i=1}^N F_i^{HLLC}[U^{(k)}] \cdot n_i \quad (5) \\ k &= 4 - k + 1, \quad k = 1, 2, 3, 4 \\ U^{n+1} &= U^{(4)} \end{aligned}$$

式中 U 是控制体上的平均值, V 是控制体的体积, F_i^{HLLC} 是控制体的第 i 个边界的 HLLC 数值通量。为了满足守恒性, U^{n+1} 必须由几何守恒定律(GCL)^[7] 得到:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V U \, dV + \int_{\partial V} U \dot{x} \cdot n \, dS = 0 \quad (6)$$

同时,为了提高流场数值解的精度,本文采用了线性重构技术和限制器^[8]。

3.2 动网格上的 HLLC 格式

HLLC 格式^[9] 是一种近似 Riemann 解的数值方法,能够精确模拟接触间断、剪力波的平均状态,可以直接求得控制体边界上的数值通量。已知 (t) 左右两侧的状态参数矢量 U_i 和 U_j ,则在 ALE 方程组(1) 和(2) 中 HLLC 数值通量的计算由下式确定:

$$F_{i,j}^{HLLC} = \begin{cases} F(U_i) & S_i > 0 \\ F(U_i^*) & S_i \leq 0 \leq S_M \\ F(U_j^*) & S_M \leq 0 \leq S_j \\ F(U_j) & S_j < 0 \end{cases} \quad (7)$$

其中

$$\begin{aligned} U_i^* &= \begin{pmatrix} u_i^* \\ (v)_i^* \\ (E)_i^* \end{pmatrix} = \frac{1}{S_i - S_M} \begin{pmatrix} (S_i - u_{n_i})_i \\ (S_i - u_{n_i})(v)_i + (p^* - p_i)n \\ (S_i - u_{n_i})(E)_i - p_i u_{n_i} + p^* S_M \end{pmatrix} \\ U_j^* &= \begin{pmatrix} u_j^* \\ (v)_j^* \\ (E)_j^* \end{pmatrix} = \frac{1}{S_j - S_M} \begin{pmatrix} (S_j - u_{n_j})_j \\ (S_j - u_{n_j})(v)_j + (p^* - p_j)n \\ (S_j - u_{n_j})(E)_j - p_j u_{n_j} + p^* S_M \end{pmatrix} \\ F_i^* \quad F(U_i^*) &= \begin{pmatrix} S_M \quad u_i^* \\ S_M (v)_i^* + p^* n \\ S_M (E)_i^* + (S_M + \dot{x} \cdot n) p^* \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} F_j^* \quad F(U_j^*) &= \begin{pmatrix} S_M \quad u_j^* \\ S_M (v)_j^* + p^* n \\ S_M (E)_j^* + (S_M + \dot{x} \cdot n) p^* \end{pmatrix} \\ p &= u_i (u_{n_i} - S_i) (u_{n_i} - S_M) + p_i \\ &= u_j (u_{n_j} - S_j) (u_{n_j} - S_M) + p_j \\ u_{n_i} &= (v_i - \dot{x}) \cdot n, \quad u_{n_j} = (v_j - \dot{x}) \cdot n \\ S_M &= \frac{u_j u_{n_j} - (S_i - u_{n_i}) - u_i u_{n_i} (S_i - u_{n_i}) + p_i + p_j}{u_j (S_j - u_{n_j}) - u_i (S_i - u_{n_i})} \\ S_i &= \min[u_{n_i} - c_i, (\hat{v} - \dot{x}) \cdot n - \hat{c}] \\ S_j &= \max[u_{n_j} - c_j, (\hat{v} - \dot{x}) \cdot n + \hat{c}] \end{aligned}$$

式中 \hat{v} 和 \hat{c} 分别是流场速度和当地声速的 Roe 平均值。

3.3 介质界面的处理

介质界面是一种接触间断,本文将其处理为一种特殊的流场内部边界,分布在该界面上的网格节点都有两种状态参数定义,分别对应界面两侧不同介质的不同状态。

对一维情形,如图 1 所示,介质界面(Interface)将介质 A 和 B 分开,分界面上的网格点有着双重定义,即分别定义这两种介质在分界面上的点,两种介质在该点上的状态矢量分别为 U_A 和 U_B 。这样,在介质分界面上就定义了 Riemann 问题的初始条件。

刚性气体状态方程下的 Riemann 问题是有解析解的^[10],因此可直接求出界面上的 Riemann 解,并得到分界面上两侧的状态参数矢量 (u_A^*, v^*, p^*) 和 (u_B^*, v^*, p^*) ,然后将它们代入 HLLC 公式(7) 中求得介质界面上的数值通量 F^{MI} ,以保证 ALE 方程组在介质边界控制体上的积分路径封闭。其中 v^* 就是图 1 中介质界面节点的移动速度, p^* 是该点上的压力,因此在这里, $\dot{x} = v^*$ 。

二维情形与一维情形相似,但 Riemann 问题定义在介质界面边的法向方向,因此初始条件中的速度改为介质界面两侧介质 A 和 B 速度的法向分量,即 v_{An} 和 v_{Bn} ,如图 2 所示。所求得的 Riemann 解状态参数矢量为 $(u_A^*, v^* + v_{An}, p^*)$ 和 $(u_B^*, v^* + v_{Bn}, p^*)$,其中 v_{An} 和 v_{Bn} 是界面两侧介质的切向速度分

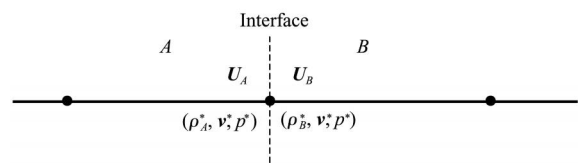


图 1 介质界面上 Riemann 问题的构造
Fig. 1 Riemann problem on the material interface

量。此时,介质界面边(同时也是网格边)的移动速度 $\dot{x} = v^*$,对界面上的节点移动速度,如图3所示,由 t 时间内节点的位移来决定,即

$$v_i = \frac{\Delta x_i}{t} \tag{8}$$

式中 v_i 是界面上第 i 个节点的移动速度, x_i 是该节点在 t 时刻到 $t + \Delta t$ 时刻的位移。这样,介质界面附近的网格就随着介质界面的运动而运动,因此,介质界面在每一时刻的运动状态都能被准确地追踪。

4 网格局部重构

介质界面在变形过程中(如膨胀和收缩),其周围网格必定会发生大程度的挤压、拉伸或者扭曲,此时对一维情形,采用弹簧近似模型^[16]实现动网格;对二维情形,则需要对变形较大而导致质量变差的网格进行重构,即将包括该网格之内的所有周围网格删除,形成一个空腔并将之作为初始阵面,然后运用阵面推进法^[11]在该空腔内重新生成网格。

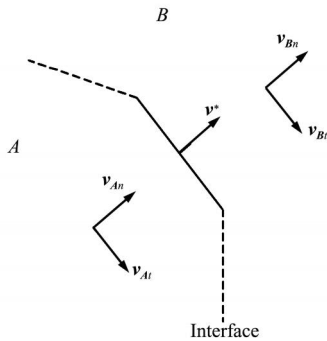


图2 二维介质界面上 Riemann 问题中的速度分解
Fig.2 Velocity's distribution at the 2D material interface

同时,介质界面上的节点也可能会有切向速度,这时界面附近的控制体体积可能会成为负值,因此本文将介质界面定义为网格变形边界,即如果在该边界上的网格边边长过长,则将该边的中点作为新节点,同时将与该边对应的边界网格分为四个网格,并将该边界网格删除,如图4(a)所示;如果该边界上的网格边边长过短,则将其周围的任意同一边界网格与其合并为一个网格,然后删除该网格以及合并后所余下的旧节点,如图4(b)所示。

网格局部重构过程结束后,本文运用网格守恒重映技术^[12]将旧网格上的流场状态参数映射到新生成的网格上,从而保证局部重构后流场状态参数在新网格中仍然保持守恒性。

鉴于流场中网格总是在不断地更新,本文采用双向链表的数据结构存储网格单元和节点,这样能够方便地进行网格删除和插入操作,同时,通过灵

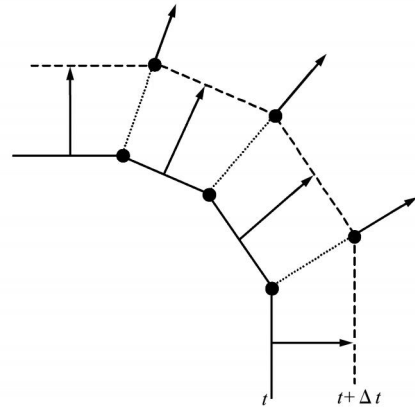
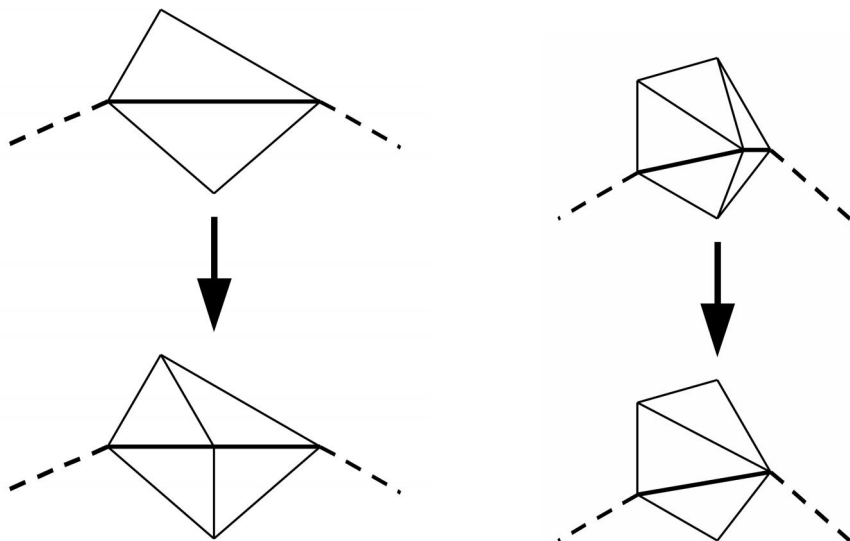


图3 二维介质界面的运动示意图
Fig.3 The motion of the 2D material interface



(a) 介质界面边过长时的处理 (b) 介质界面边过短时的处理

图4 介质界面边的变形处理
Fig.4 Dealing with the deformation of the material interface edges

活运用指针来减少内存中数据单元的寻址时间。

5 数值算例

5.1 空气-水激波管模型

该模型用来检验本文的数值方法在介质界面上存在大压力梯度时的数值稳定性,假设长度为

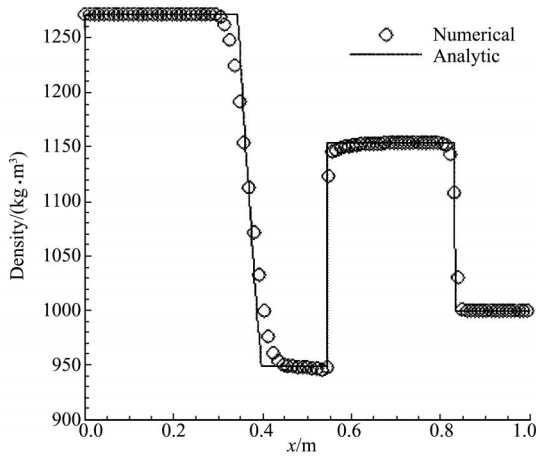
1 m 的激波管内分别放有高度压缩的空气 (G) 和水 (W),其初始条件 (国际标准单位制 SI) 描述为

$$\rho_G = 1.271 \times 10^3, v_G = 0$$

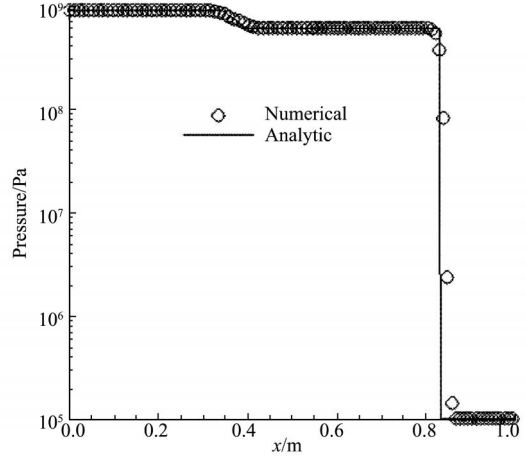
$$p_G = 9.11925 \times 10^8, 0 \leq x < 0.5$$

$$\rho_W = 1.0 \times 10^3, v_W = 0$$

$$p_W = 1.01325 \times 10^5, 0.5 \leq x \leq 1$$



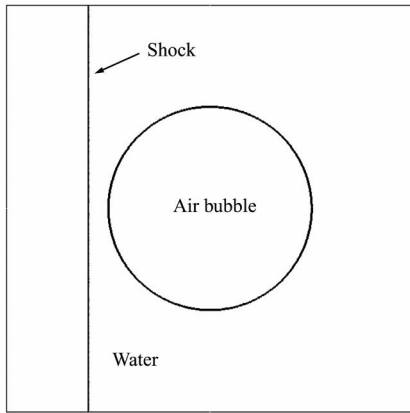
(a) 密度



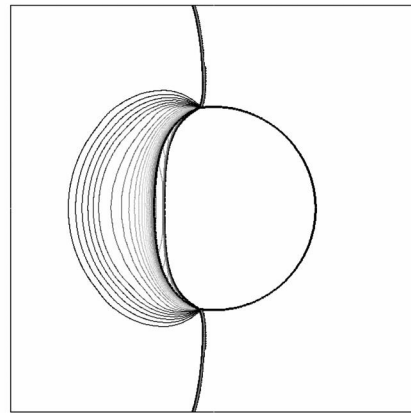
(b) 压力

图 5 空气 - 水激波管问题 $t = 0.1559$ ms 时的密度和压力分布曲线

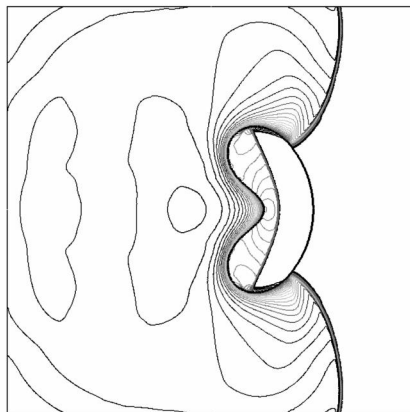
Fig. 5 The distribution of density and pressure in air-water shock tube at $t = 0.1559$ ms



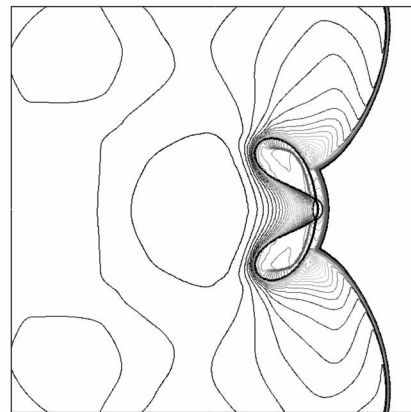
(a) $t = 0 \mu s$



(b) $t = 1.0 \mu s$



(c) $t = 2.5 \mu s$



(d) $t = 3.05 \mu s$

图 6 水中激波与空气泡相互作用模型在不同时刻的压力等值线分布

Fig. 6 Pressure contours at different times during the interaction between the planar shock in the water and the cylindrical air bubble

图 5 为网格数为 201、时间 $t = 0.1559 \text{ ms}$ 时计算得到的激波管内密度和压力分布曲线以及该模型对应的解析解。从图 5 中看出, 激波管内密度和压力的分布与解析解吻合得很好, 而且介质界面上看不出压力的非物理震荡, 说明本文的方法在处理存在大压力梯度的介质界面时, 能保证介质界面上压力值的连续性。

5.2 水中激波诱导气泡变形

该算例来自于文献 [13], 但本文与该文献不同的是: 在介质界面的追踪方法上, 本文采用的运动网格上的 ALE 方法, 而文献 [13] 采用的是固定网格上的 Level Set 方法; 在水的状态方程选取上, 本文采用的是刚性气体状态方程, 即式 (3), 而文献 [13] 则采用的是 Tait 状态方程^[1]。该模型描述为: 水中有一个半径为 3 mm 的柱形空气泡, 中心坐标为 (0, 0), 气泡内空气密度为 1.0 kg/m^3 , 压力为 $1.0 \times 10^5 \text{ Pa}$, 水的密度为 $1.0 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$ 。在距离气泡中心左侧 3.6 mm 处有一向右运动的平面激波 ($1.9 \times 10^9 \text{ Pa}$)。该水中激波波后状态 (标记为 PW, 即 Post-shocked Water) 为

$$p_{PW} = 1.31 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$$

$$p_{PW} = 1.9 \times 10^9 \text{ Pa}$$

$$v_{PW} = (673.2, 0.0)^T \text{ m/s}$$

计算区域为 $12 \times 12 \text{ mm}^2$, 初始三角形网格数为 190165。图 6(a) 为流场的初始状态, 粗线表示气泡界面。水中激波到达气泡左侧界面时, 会产生两种运动波: 向水传播的稀疏波和向气泡内部运动的透射激波, 如图 6(b) 所示。由于水中的声速比空气中的声速大, 因此水中激波比气泡内部的透射激波的运动速度快。从图 6(c) 中可以看到, 气泡中心线附近的左侧界面逐渐凹进气泡, 同时凹进去的区域压力等值线较为密集, 此处最大压力约为 $2.8 \times 10^8 \text{ Pa}$, 水的向右水平速度已达到 2800 m/s 左右, 迫使气泡左侧界面继续深入内凹并且破裂。图 6(d) 为气泡即将破裂时的临界状态, 此时水中激波已经穿过气泡右侧界面, 同时气泡内凹处压力大幅度增加, 约为 $6.6 \times 10^9 \text{ Pa}$ 。在气泡破裂瞬间, 此处将产生较大强度的冲击波。图 7 为 $t = 2.5 \mu\text{s}$ 时气泡界面上网格节点的运动速度矢量分布图, 可以看出气

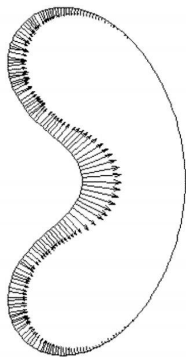


图 7 $t = 2.5 \mu\text{s}$ 时气泡界面的运动速度矢量分布
Fig. 7 The velocity vectors at the bubble interface $t = 2.5 \mu\text{s}$

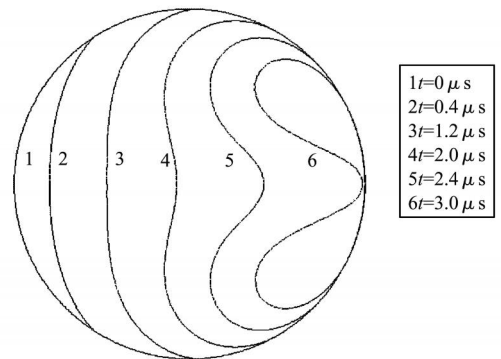
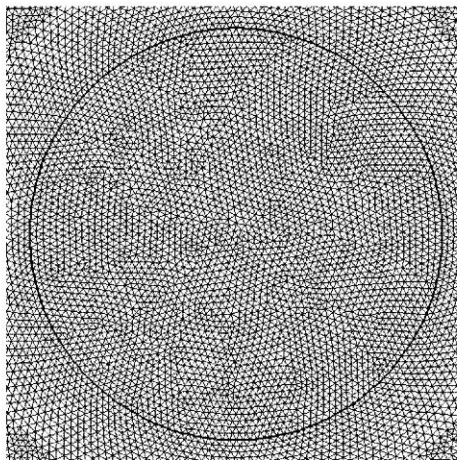
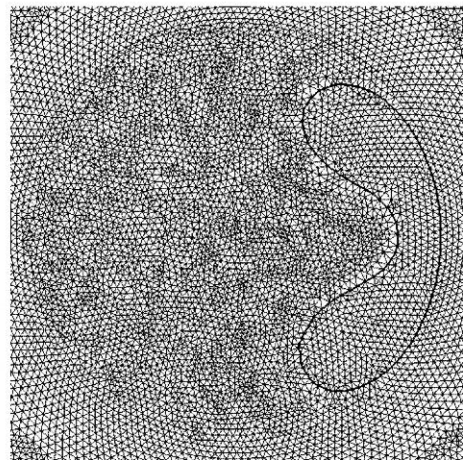


图 8 不同时刻的气泡界面形状
Fig. 8 The profiles of the air bubble at different times



(a) $t = 0 \mu\text{s}$



(b) $t = 2.8 \mu\text{s}$

图 9 气泡界面附近在不同时刻下的网络 (较粗网格)

Fig. 9 The grids at different times near the bubble interface (the coarser grids)

泡凹处的界面节点运动速度最大,气泡右侧界面则没有运动速度,这是因为气泡内空气具有可压缩性,右侧界面不会受到扰动直至气泡内部的透射激波到达。同时也可看出 ALE 方法的优点:能够时刻追踪介质界面上每个节点的运动状态。图 8 为气泡界面在不同时刻的外形,可以看出气泡界面的变化过程:左侧界面向右移动并逐渐内凹,气泡最终会在凹点处破裂。图 9 为 $t = 0 \mu\text{s}$ 和 $t = 2.8 \mu\text{s}$ 时气泡界面附近的网格(较粗网格下),可以看到,气泡界面是由网格边组成的内部边界,其周围网格随着界面的运动而运动,如果网格质量系数小到指定值,则自动进行局部重构。

在文献[13]中,气泡的破裂时间约为 $3.1 \mu\text{s}$,而本文中气泡破裂时间在 $3.05 \mu\text{s}$ 后的瞬间,这是因为文献[13]和本文在计算方法和水的状态方程选取上的不同所造成的。另外,文献[14,15]也计算了水中激波诱导气泡变形过程,只是激波初始位置和计算区域有所不同,但都得到了与本文相似的计算结果。这表明了本文在动网格上计算多介质流的 ALE 方法是可行的。

6 结论与展望

在对可压缩多介质流动的数值模拟中,本文定义介质界面为一种由网格边组成的内部边界,并通过求解 Riemann 问题追踪介质界面上网格节点的运动,同时采用局部重构的动网格技术处理介质界面的大变形问题,运用 HLLC 格式求解 ALE 方程组得到整个多介质流场的数值解。在对一维空气-水激波管模型和二维水中平面激波诱导空气泡变形模型的计算结果中可以看出,本文在动网格上求解可压缩多介质流场的 ALE 方法是可行的,并且可以时刻追踪到介质界面的运动状态。

同时,在二维水中平面激波诱导空气泡变形模型的计算过程中,气泡在破裂瞬间,如何确定气泡破裂的数值判断条件以及如何处理破裂后气泡界面附近网格拓扑结构的变化,ALE 方法在解决这些问题时将会面临着很大的考验,这也是本文作者下一步的研究方向。

参考文献(References):

[1] Fedkiw R P, Aslam T, Mmrriman B, et al. A non-oscillatory Eulerian approach to interfaces in multima-

terial flows (the ghost fluid method) [J]. *Journal Of Computational Physics*, 1999(152):457-492.

- [2] Chen L, Li Y. A numerical method for two-phase flows with an interface [J]. *Environmental Modelling & Software*, 1998(13):247-255.
- [3] Shyue K. An efficient shock-capturing algorithm for compressible multicomponent problem [J]. *Journal of Computational Physics*, 1998(142):208-242.
- [4] Abgrall R, Karni S. Computations of compressible multifluids [J]. *Journal of Computational Physics*, 2001(169):594-623.
- [5] Liu T G, Khoo B C, Yeo K S. Ghost fluid method for strong shock impacting on material interface [J]. *Journal of Computational Physics*, 2003(190):651-681.
- [6] Hirt C W, Amsden A A, Cook J L. An arbitrary Lagrangian-Eulerian computing method for all flow speeds [J]. *Journal of Computational Physics*, 1974, **14**(3):227-253.
- [7] Thomas P D, Lombard C K. Geometric conservation law and its application to flow computations on moving grids [J]. *AIAA Journal*, 1978, **17**(10):1030-1037.
- [8] 李荫藩, 宋松和, 周 铁. 双曲型守恒律的高阶、高分辨有限体积法 [J]. *力学进展*, 2001, **21**(2):245-263. (LI Yin-fan, SONG Song-he, ZHOU Tie. High order, high resolution finite volume methods for hyperbolic conservation laws [J]. *Advances in Mechanics*, 2001, **31**(2):245-263. (in Chinese))
- [9] Toro E F, Spruce M, Spears W. Restoration of the contact surface in the HLL-Riemann solver [J]. *Shock Waves*, 1994, **4**(1):25-34.
- [10] Chang C H, Liou M S. A robust and accurate approach to computing compressible multiphase flow: Stratified flow model and AUSM⁺-up scheme [J]. *Journal of Computational Physics*, 2007, **225**(1):840-873.
- [11] 许厚谦, 王 兵. 一种新型的阵面推进法及其数据结构的应用 [J]. *弹道学报*, 2005, **17**(2):65-68. (XU Hou-qian, WANG Bing. A new advancing-front method and the data structure applied on it [J]. *Journal of Ballistics*, 2005, **17**(2):65-68. (in Chinese))
- [12] Ramshaw J D. Conservative rezoning algorithm for generalized two-dimensional meshes [J]. *Journal of Computational Physics*, 1985, **59**:193-199.

- [13] Hu X Y, Khoo B C. An interface interaction method for compressible multifluids[J]. *Journal of Computational Physics*, 2004(198) :35-64.
- [14] Ball G J, Howell B P, Leighton T G, et al. Shock-induced collapse of a cylindrical air cavity in water: a Free-Lagrange simulation [J]. *Shock Waves*, 2000 (10) :265-276.
- [15] Nourgaiev R R, Dinh T N, Theofanous T G. Adaptive characteristics-based matching for compressible multifluid dynamics [J]. *Journal of Computational Physics*, 2006(213) :500-529.
- [16] Frederic J Blom. Considerations on the spring analogy[J]. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 2000 ,32(6) :647-668.

Moving grid method in numerical simulation of compressible multi-material flows

WANG Bing^{*}, SI Hai-qing

(Civil Aviation School, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210094, China)

Abstract : In the numerical simulation of compressible multi-material flows, the material interface is defined as a special internal boundary composed by unstructured grid edges, either side of which corresponds to a grid of one material. Riemann problem is solved in order to track the motion of the grid points on the material interface and local re-meshing technology is applied to deal with the large-scale deformation of the moving grids. At the same time, the material interface is defined as a kind of grid-deforming boundary to avoid negative grid volumes near the interface. HLLC scheme is used to solve ALE formulations to obtain the resolutions of the whole multi-material fluid domain. Several multi-material modules are computed to indicate that the method in this paper is feasible and successful in tracking the motion state of the material interface.

Key words : Compressible multi-material flows; Moving Grids; Grid local re-meshing technology; ALE formulations; HLLC Scheme