

多介质大变形流动的 MOF-MMALE 数值模拟研究*

曾清红, 孙文俊

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)

摘要: 多介质大变形流动数值模拟的关键和难点是在精确追踪物质界面的同时又能够处理好流体大变形运动.将 MOF (moment-of-fluid) 界面重构算法与多介质任意 Lagrange-Euler 方法 (MMALE) 相耦合,形成 MOF-MMALE 方法,并应用于多介质大变形流动问题的数值模拟研究. MOF-MMALE 方法在传统的 ALE 方法基础上,允许计算网格边界跨过物质界面,允许存在混合网格,即一个网格内可以存在两种或两种以上物质;在混合网格内,利用 MOF 界面重构算法来确定物质界面的位置和方向.数值算例表明, MOF-MMALE 方法是模拟多介质大变形流动的有效手段,并且具有较好的数值精度和界面分辨率.

关键词: 多介质大变形流动; MMALE; MOF 界面重构; 混合网格; 封闭模型

中图分类号: O242 **文献标志码:** A

doi: 10.3879/j.issn.1000-0887.2014.10.011

引 言

在天体物理、武器物理、惯性约束聚变^[1]等领域,很多问题都涉及到多介质大变形流动.多介质大变形流动有两个重要的特点:一是存在多种物质,物质之间存在着清晰的物质界面;二是流体的变形很大.这类问题由于自身流场的复杂性和多介质界面的严重扭曲,在理论研究中存在诸多难点,具有很强的挑战性.目前,数值模拟仍是研究这类问题的重要手段之一.如何在精确追踪物质界面的同时又能够处理好流体大变形运动,是多介质大变形流动数值模拟的关键和难点^[2].

目前,多介质大变形流动的数值模拟主要有 Lagrange 方法、Euler 方法和任意 Lagrange-Euler (ALE) 方法^[3].Lagrange 方法追踪物质界面非常方便,但网格随着流体的运动容易发生大变形,网格的大变形扭曲将引入较大的数值误差,甚至导致计算终止.Euler 方法在整个计算过程中网格固定不动,能够处理流体大变形,但 Euler 方法网格之间物理量的输运将产生较大的

* 收稿日期: 2013-10-28; 修订日期: 2014-02-24

基金项目: 国家自然科学基金(11001026;11371068);国家高技术研究发展计划(863 计划)(2012AA01A303)

作者简介: 曾清红(1978—),男,长沙人,副研究员,博士(Tel: +86-10-59711494;
E-mail: zeng.qinghong@iapcm.ac.cn);

孙文俊(1974—),男,河南南阳人,副研究员,博士(通讯作者. Tel: +86-10-59872185;
E-mail: sun.wenjun@iapcm.ac.cn).

数值耗散。ALE 方法是 Lagrange 方法和 Euler 方法的耦合,能够有效缓解网格的大变形。为了维持清晰的物质界面,ALE 方法在重分重映时(本文中重分指保持网格拓扑不变的重分)通常只在单个物质内部进行,即保持物质界面的重分重映^[4]。这种策略对物质界面变形不大的问题是有效的,但是对于物质界面变形很大的问题则同样无能为力,因为在物质界面变形很大的情况下保持界面的网格重分是非常困难的。例如 Rayleigh-Taylor(瑞利-泰勒)不稳定性问题发展后期形成的钉尖型界面,以此为边界很难生成高质量的网格。

为了改变多介质大变形流动数值模拟的困境,近年来,美、欧、俄、中等国家的若干研究小组,特别是涉及核科学研究的美国 Los Alamos(洛斯阿拉莫斯)和 Livermore(利弗莫尔)国家实验室在该领域开展了大量相关的研究。近几年来,它们基于传统的 ALE 方法发展了 MMALE 方法^[5-7]。与传统的 ALE 方法不同,MMALE 方法对于变形很大的物质界面放弃保持界面为 Lagrange 网格线的限制,允许物质界面跨过网格,允许存在混合格网(网格内有两种或两种以上物质),这样就减少了网格重分的约束。与此同时,MMALE 方法要求重分的网格与拉氏网格尽量接近,这样能够减小物理量的数值扩散。对于像高压压缩内爆这种多介质大变形、大收缩比问题,MMALE 方法具有明显的优势^[8]。

本文将 MOF 界面重构与 MMALE 方法相耦合,形成 MOF-MMALE 方法,并应用于多介质大变形流动问题的数值模拟研究。与传统的 ALE 方法,或者基于 VOF(volume of fluid)的多介质 ALE 方法相比,MOF-MMALE 方法具有更好的数值精度和分辨率,重构的物质界面具有更为丰富的局部细化特征。文章首先描述了 MOF 界面重构,然后将 MOF 与 MMALE 方法相耦合,建立了 MOF-MMALE 方法,并详细给出了 MOF-MMALE 方法的计算流程、混合格网模型、封闭模型等;最后给出了多介质大变形流动典型问题的 MOF-MMALE 数值模拟算例,并给出结论。

1 MOF 界面重构

MOF 是一种界面重构方法,与 VOF 类似,在混合格网内也是用一条直线来近似物质界面^[9-11],如图 1 所示。但与 VOF 不同的是,MOF 方法不但利用混合格网内各介质的体积份额,而且还利用介质的形心来重构界面。MOF 具有二阶精度,由于重构只在混合格网内部进行,能够分辨单个网格尺度下的界面特征,并且不需要相邻网格的信息,容易实现并行计算和处理物理边界上的混合格网^[9]。英国核武研究院的 Barlow 教授在报告中指出 MOF 是一种深具潜力的界面重构方法^[8]。

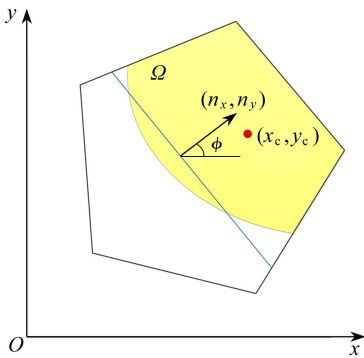


图 1 MOF 界面重构

Fig.1 MOF interface reconstruction

图 1 中展现了一个包含两种物质的混合格网,曲线段是真实的物质界面,直线段是重构的界面,阴影部分 Ω 是参考物质。 ϕ 是界面方向与 x 轴的夹角, $(n_x, n_y) = (\cos \phi, \sin \phi)$ 是界面单位法向量。 (x_c, y_c) 是参考形心,平面几何下定义为

$$x_c = \frac{\int_{\Omega} x dx dy}{A_{\Omega}}, \quad y_c = \frac{\int_{\Omega} y dx dy}{A_{\Omega}}, \quad (1)$$

其中 $A_{\Omega} = \int_{\Omega} dx dy$ 是 Ω 的面积。在混合格网的体积份额得到严格满足的前提下,MOF 要求计算形心与参考形心之间的误差最小,即令目标函数

$$E(\phi) = [x_c^{\text{comp}}(\phi) - x_c]^2 + [y_c^{\text{comp}}(\phi) - y_c]^2 \quad (2)$$

取极小值的 ϕ 就是所求的界面方向,式中 $(x_c^{\text{comp}}, y_c^{\text{comp}})$ 是计算形心。

平面几何下重构的物质界面可以表示为直线 $n_x \cdot x + n_y \cdot y + d = 0$, 有两个自由变量(界面方向和截距 d), 但只有一个约束条件(体积份额), 因此该问题是超定的, 必须通过优化算法求解, 本文使用的是不需求导的 Brent 算法^[12]。在一个两种介质的混合网格内, 使用 Brent 算法求解一元优化问题的 MOF 界面重构的过程如下:

(a) 选取界面方向初值, 作为 Brent 算法的迭代初值。一般选取

$$(n_{x0}, n_{y0}) = \frac{(x_c - x_c^{\text{cell}}, y_c - y_c^{\text{cell}})}{\sqrt{(x_c - x_c^{\text{cell}})^2 + (y_c - y_c^{\text{cell}})^2}},$$

这里 $(x_c^{\text{cell}}, y_c^{\text{cell}})$ 是混合网格的形心, 进而求得初始界面方向的夹角 ϕ_0 。

(b) 确定 Brent 算法的搜索区间。初始界面方向确定之后, 将 Brent 的搜索区间设置为 $[\phi_0 - 45^\circ, \phi_0 + 45^\circ]$, 实际计算表明该搜索区间对绝大多数应用适合。

(c) 对于确定的界面方向, 用泛洪法^[9]在混合网格中计算界面截距 d , 以精确满足给定的体积份额。

(d) 调用 Brent 优化算法, 求得使目标函数(2)取极小的变量 ϕ_{\min} , $(n_x, n_y) = (\cos \phi_{\min}, \sin \phi_{\min})$ 即是所求的界面方向。再一次调用泛洪法确定截距 d_{\min} 。

2 MOF-MMALE 方法

将 MOF 界面重构耦合进 MMALE, 形成 MOF-MMALE 方法。由于混合网格的出现, 在 MOF-MMALE 方法中重点是对混合网格的处理。首先给出 MOF-MMALE 方法的计算流程, 然后给出计算的各个步骤。

2.1 计算流程

除了包括传统 ALE 方法 3 个步骤: 拉氏计算、网格重分和物理量重映, MOF-MMALE 方法还需要建立混合网格模型、调用封闭模型更新体积份额、调用 MOF 界面重构确定界面位置, 其整体计算流程如图 2 所示。在 MOF-MMALE 方法的计算过程中, MOF 界面重构在拉氏网格上进行, 拉氏计算为其提供混合网格中各物质的体积份额和形心, 而 MOF 界面重构又为混合网格的物理量重映提供清晰的物质界面, 这样就实现了 MOF 与 MMALE 计算的耦合。

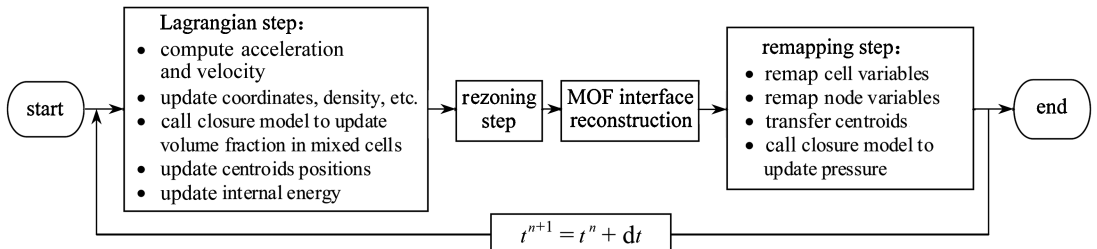


图 2 MOF-MMALE 方法计算流程

Fig.2 Flowchart of the MOF-MMALE method

2.2 混合网格模型

采用单速度多介质流体力学守恒方程组对多介质大变形流动进行建模^[13]。基于该模型, 混合网格内各物质具有相同的速度, 但是具有不同的热力学量, 如密度、比内能、压力等, 如图 3 所示。单速度多介质流体力学守恒方程组可写为

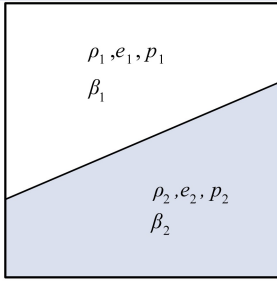


图3 混合网格模型

Fig.3 The mixed cell model

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{d\mathbf{u}}{dt} &= -\frac{1}{\rho} \nabla p, \\ \frac{d\rho_i}{dt} &= -\rho_i \nabla \cdot \mathbf{u}_i, \\ \frac{d\beta_i}{dt} &= \beta_i (\nabla \cdot \mathbf{u}_i - \nabla \cdot \mathbf{u}), \\ \frac{de_i}{dt} &= -\frac{p_i}{\rho_i} \nabla \cdot \mathbf{u}_i, \\ \frac{d\mathbf{x}}{dt} &= \mathbf{u}, \end{aligned} \right. \quad (3)$$

其中, $\rho_i, \mathbf{u}_i, \beta_i, e_i$ 和 p_i 分别是第 i 种介质的密度、速度、体积份额、比内能和压力, \mathbf{u}, ρ 和 p 是流体的速度、等效密度和等效压力, \mathbf{x} 是空间坐标, t 是时间, 状态方程为

$$p_i = p_i(\rho_i, e_i). \quad (4)$$

由公式(3)第3式可以得到

$$\sum_i \beta_i \nabla \cdot \mathbf{u}_i = \nabla \cdot \mathbf{u}. \quad (5)$$

由于未知量多于方程的数目, 因此守恒方程组(3), (4)是不封闭的, 需要增加额外的假设才能计算各物质的散度 $\nabla \cdot \mathbf{u}_i$ 和混合网格的等效压力 p , 此项内容在 2.5 小节中讨论。

2.3 拉氏计算

拉氏计算采用相容性算法^[14-17]。相容性算法是在交错网格上建立的一种经典的流体力学格式, 本文将将其拓展至多介质的情形。动量方程的半离散形式为

$$M_p \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \sum_z f_z^p, \quad (6)$$

其中 M_p 为节点质量, 由等效密度计算得到; f_z^p 为网格 z 节点 p 处的作用力, 由等效压力计算得到。第 k 种物质内能方程的离散形式为

$$M_{k,z} \frac{de_{k,z}}{dt} = - \sum_p F_{k,z} f_{k,p}^z \cdot \mathbf{u}_p, \quad (7)$$

其中 $M_{k,z}$ 为网格 z 第 k 种物质的质量, $e_{k,z}$ 为第 k 种物质的比内能, $F_{k,z}$ 为第 k 种物质的体积份额, $f_{k,p}^z \cdot \mathbf{u}_p$ 为网格 z 第 k 种物质作用力在节点 p 的做功。需要注意的是, 这里 $f_{k,p}^z$ 是认为第 k 种物质充满整个混合网格计算得到的。

时间离散采用预估-校正算法^[14], 在时间上达到两阶精度。

2.4 重分和重映

目前在实际计算中采用简单的重分策略, 例如退回到初始网格, 即相当于 Euler 网格。根据不同的问题, 可能相应会做一些调整。

在多介质情况下, 由 MOF 确定的界面位置被用于物理量重映。物理量重映包括网格量重映和节点量重映两类, 目前均采用面积求交的策略。对于网格量(如密度、体积、内能)重映, 利用 Sutherland-Hodgman 多边形求交算法, 计算新网格与拉氏网格上每一种介质的交集, 根据守恒量, 重映得到新网格上的网格量。对于节点量(如速度)和子网格质量, 采用子网格重映方法^[18]。将新网格和拉氏网格都拆分为 2×2 的子网格, 在拉氏子网格上利用 MOF 重构的界面确定每一种介质的区域, 然后由子网格重映算法得到新网格的节点速度和子网格质量。

2.5 封闭模型

在 MOF-MMALE 方法的拉氏步, 不但需要更新动量和能量方程的物理量, 而且需要更新

混合网格的体积份额;在重映步结束时,需要计算混合网格的等效压力.选择合适的封闭模型对于 MOF-MMALE 方法至关重要,这里采用各介质压力增量相等并考虑压力弛豫过程的封闭模型^[13].

首先考虑各介质压力增量相等,即 $\Delta p_i = \Delta p_k$, 由声速定义可得

$$\frac{dp_i}{dt} = c_i^2 \frac{d\rho_i}{dt} = -\rho_i c_i^2 \nabla \cdot \mathbf{u}_i, \quad (8)$$

由此可以得到 $\rho_i c_i^2 \nabla \cdot \mathbf{u}_i = \rho_k c_k^2 \nabla \cdot \mathbf{u}_k$, 代入式(5)有

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_i = \lambda_i \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (9)$$

其中 $\lambda_i = \left(\rho_i c_i^2 \sum_k \beta_k / (\rho_k c_k^2) \right)^{-1}$.

压力弛豫过程的散度为

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_i = -\frac{\Delta p_i}{\tau \rho_i c_i^2}, \quad (10)$$

其中 $\Delta p_i = \bar{c} \tau (p - p_i) / h$, \bar{c} 为平均声速, τ 是时间步长.两个过程叠加得到

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_i = \lambda_i \nabla \cdot \mathbf{u} - \frac{\Delta p_i}{\tau \rho_i c_i^2}, \quad (11)$$

容易推出等效压力

$$p = \sum_i \beta_i \lambda_i p_i. \quad (12)$$

3 数值算例

应用 MOF-MMALE 方法对多介质大变形流动的典型问题,包括两种介质激波管问题、三介质界面问题、Rayleigh-Taylor 不稳定性问题和激波气泡相互作用问题进行了数值模拟研究.所有算例均基于平面几何,采用理想气体状态方程 $p = \rho e(\gamma - 1)$, 其中 γ 是比热比.

3.1 两种介质激波管问题

激波管区域为 $[0, 1]$, 初始时刻中间位置 $x = 0.5$ 有一隔膜将左右两边物质分割开.左边物质的初始状态为 $(\rho_l, p_l, u_l, \gamma_l) = (1, 1, 0, 1.4)$, 右边物质的初始状态为 $(\rho_r, p_r, u_r, \gamma_r) = (0.125, 0.1, 0, 5/3)$. 由于两侧 γ 不同, 这是一个真正的多介质问题.

表 1 两种介质激波管问题 MOF-MMALE 和拉氏计算结果在接触间断处的比较

Table 1 The 2-material shock tube problem, comparison of MOF-MMALE results with exact solutions and Lagrangian results at the contact discontinuity

contact discontinuity	position	velocity u	pressure p	density ρ	
				left	right
exact	0.680 50	0.901 408	0.314 383	0.437 565	0.237 536
Lagrangian200 cells	0.679 86	0.901 235	0.314 421	0.437 049	0.207 036
Lagrangian400 cells	0.680 01	0.901 301	0.314 367	0.437 210	0.204 468
MOF-MMALE 200 cells	0.678 70	0.896 663	0.316 911	0.435 826	0.242 794
MOF-MMALE 400 cells	0.679 25	0.896 973	0.316 600	0.436 208	0.241 666

激波管的 4 个边界均设置为固壁, 初始网格均匀分布. 分别划分 200 和 400 个网格, 使用 MOF-MMALE 方法对该问题进行了模拟. 计算到 $t_f = 0.2$ 时刻, 将计算结果与精确解和拉氏结果(400 网格)进行了比较, 如图 4 所示. 为了清楚起见, 图中数据点是稀疏后的结果. 对于 MOF-

MMALE 计算,时间步长固定为 10^{-4} ,在拉氏步之后将拉氏网格重分回初始网格.

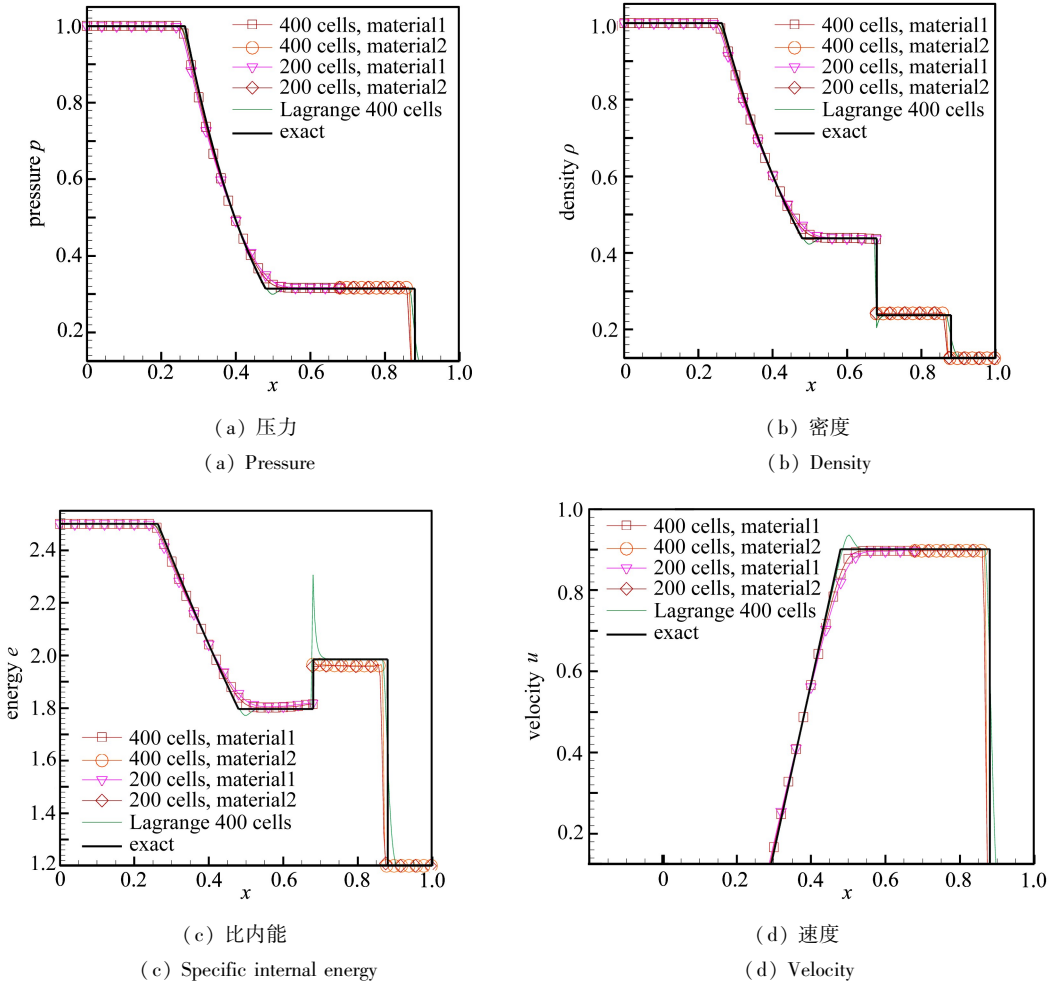


图 4 两种介质激波管问题 MOF-MMALE 计算结果与精确解、拉氏计算结果的比较
Fig.4 The 2-material shock tube problem, comparison of MOF-MMALE results with exact solutions and Lagrangian results

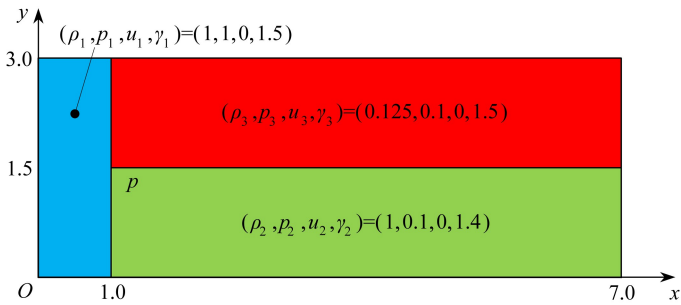


图 5 三介质界面问题
Fig.5 A triple point problem

从上面的数值结果来看,MOF-MMALE 和拉氏结果都与精确解吻合得较好.但是在接触间断附近拉氏结果有明显的壁热现象,在图 4(c)上表现为比内能突然升高,而 MOF-MMALE 结果则没有这个现象.表 1 详细比较了两种方法计算结果在接触间断处的差别.从具体数据分析

可知,接触间断处拉氏计算的位置和密度等物理量均稍好于 MOF-MMALE 计算的结果,这是因为精确追踪物质界面正是拉氏方法的优势所在.即便如此,MOF-MMALE 结果还是令人比较满意的.

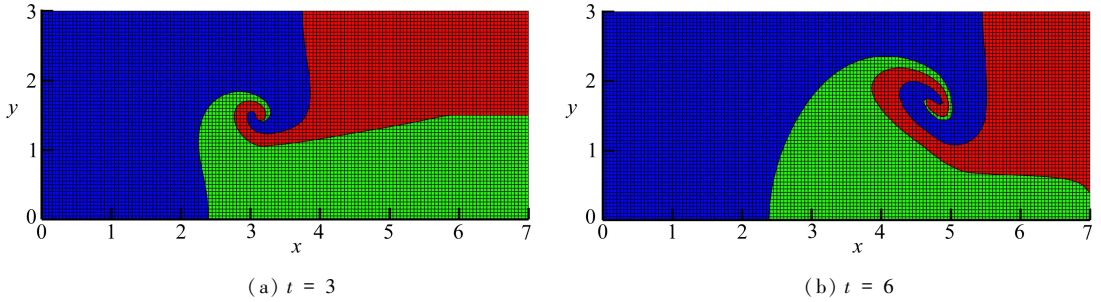


图 6 三介质界面问题 MOF-MMALE 模拟结果

Fig.6 The MOF-MMALE numerical results of the triple point problem with time

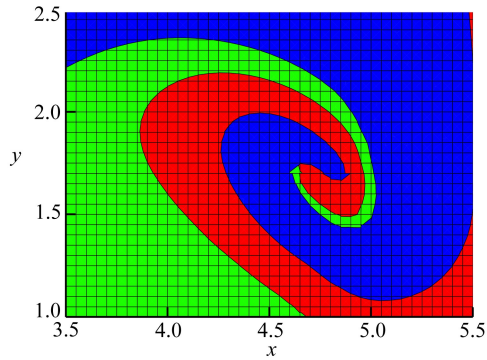
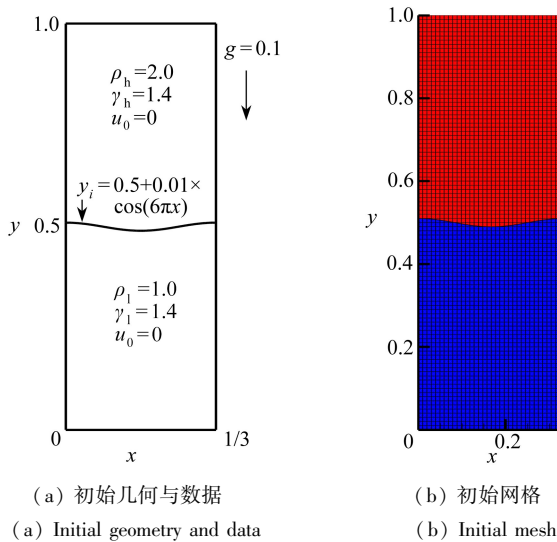


图 7 $t = 6$ 时刻旋涡附近放大图

Fig.7 Enlarged view of the triple point problem at the vortex for $t = 6$



(a) 初始几何与数据

(a) Initial geometry and data

(b) 初始网格

(b) Initial mesh

图 8 Rayleigh-Taylor 不稳定性问题

Fig.8 The Rayleigh-Taylor instability problem

3.2 三介质界面问题

在矩形计算区域 $[0, 7] \times [0, 3]$ 上存在 3 种介质, 3 种介质界面相交于一点 p , 如图 5 所示.

区域左边是第 1 种介质,初始状态 $(\rho_1, p_1, u_1, \gamma_1) = (1, 1, 0, 1.5)$;区域右下是第 2 种物质,初始状态 $(\rho_2, p_2, u_2, \gamma_2) = (1, 0.1, 0, 1.4)$;区域右上是第 3 种物质,初始状态 $(\rho_3, p_3, u_3, \gamma_3) = (0.125, 0.1, 0, 1.5)$.初始时刻 3 种物质均静止,形成一个 T 型界面.左边的第 1 种物质具有较高的压力,将产生一道向右传播的激波.由于物质参数的不同,激波在第 3 种物质中传播得较快,而在第 2 种物质中传播得较慢,这样沿着第 2 和第 3 种物质的界面产生剪切作用,进而导致 Kelvin-Helmholtz 不稳定性,围绕点 p 将形成一个旋涡.

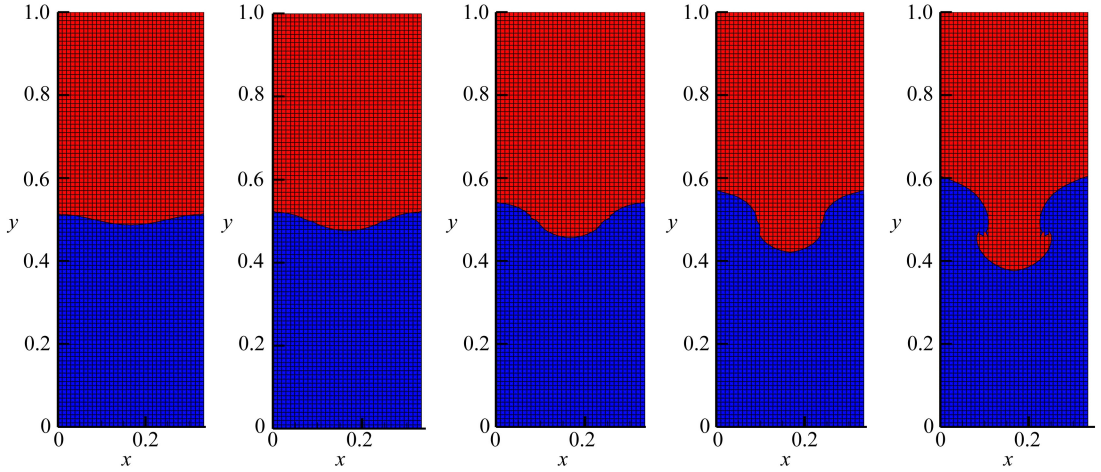
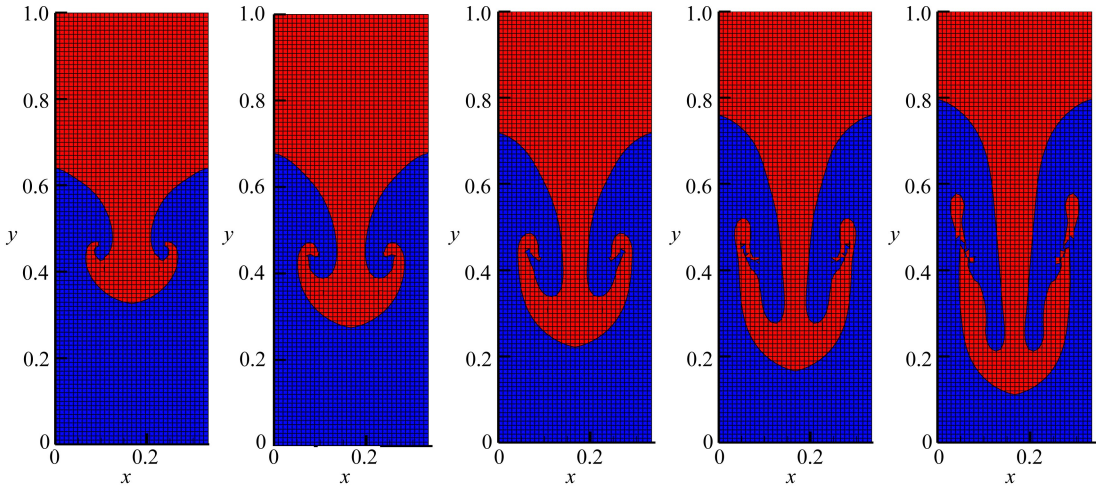
(a) $t = 1 \sim 5$ 的物质界面(a) The material interface for $t = 1 \sim 5$ (b) $t = 6 \sim 10$ 的物质界面(b) The material interface for $t = 6 \sim 10$

图 9 Rayleigh-Taylor 不稳定性问题 MOF-MMALE 模拟结果

Fig.9 The MOF-MMALE numerical results of the Rayleigh-Taylor instability problem

计算使用 140×60 的均匀方形网格,所有边界均设置为固壁边界条件.时间步长固定为 0.001,计算到最后时刻 $t_f = 6$,每步计算均回到初始网格.该问题初始时刻不存在混合网格,混合网格在第一步计算之后出现,并且计算区域中总有一个或多个混合网格同时包含 3 种物质.图 6 是 $t = 3$ 和 $t = 6$ 两个时刻 MOF-MMALE 模拟的结果.旋涡随着时间不断发展,最后形成细长的带状结构. $t = 6$ 时刻旋涡附近的放大图如图 7 示,从图中可以看出,MOF-MMALE 不但能够

正确模拟多种物质界面的发展,而且重构的物质界面比较光滑。

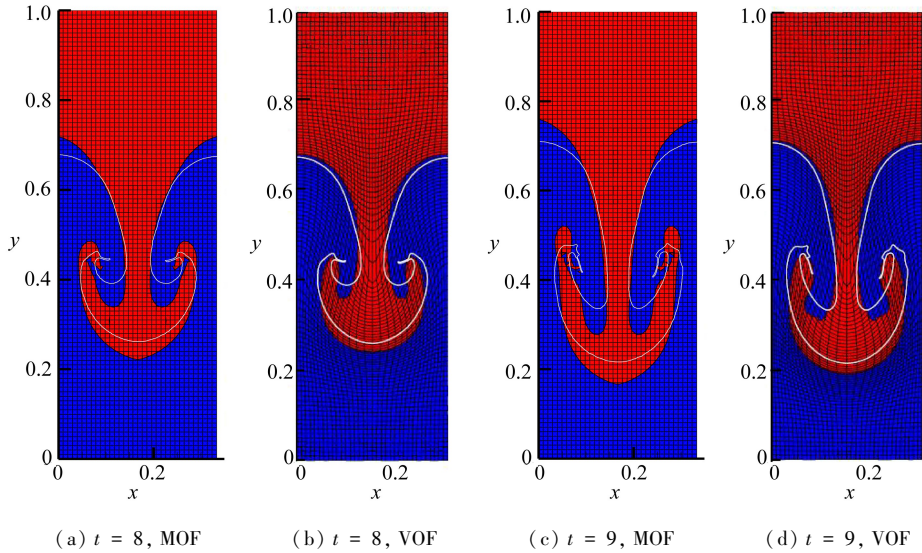


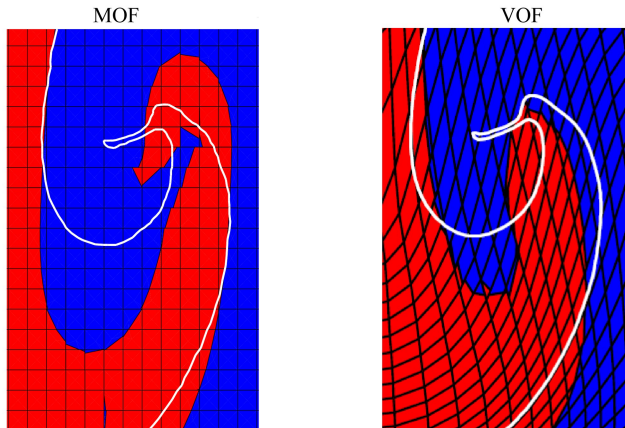
图 10 $t = 8$ 和 $t = 9$ 两个时刻 MOF-MMALE 与 front tracking, VOF 结果的比较(白线是 front tracking 结果)
Fig.10 Comparison of the MOF-MMALE interfaces with those of the front tracking and VOF for $t = 8$ and $t = 9$

3.3 Rayleigh-Taylor 不稳定性问题

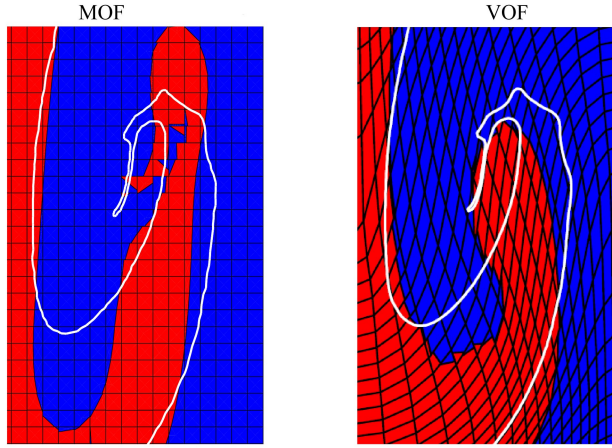
Rayleigh-Taylor 不稳定性问题是最经典的多介质大变形问题之一,如图 8(a)所示.在矩形区域 $[0, 1/3] \times [0, 1]$ 上分布着两种流体,由界面 $y_i(x) = 0.5 + a_0 \cos(6\pi x)$ 分隔开,界面扰动幅度 $a_0 = 0.01$.上面流体的密度 $\rho_h = 2$,下面流体的密度 $\rho_l = 1$,两种流体的比热比相等 $\gamma_h = \gamma_l = 1.4$.流体在重力场中受重力作用,重力加速度 $\mathbf{g} = (g_x, g_y)^T = (0, -0.1)^T$.初始时刻两种流体均静止不动,其压力分布由静压力平衡得到

$$\begin{cases} p_h(x, y) = 1 + \rho_h g_y (y - 1), & y > y_i(x), \\ p_l(x, y) = 1 + \rho_h g_y [y_i(x) - 1] + \rho_l g_y [y - y_i(x)], & y \leq y_i(x). \end{cases} \quad (13)$$

这种配置是不稳定的,随着时间发展,上面重的流体会往下沉而下面轻的流体会往上浮.使用 34×100 的初始方形网格,如图 8(b)所示,初始就存在混合格网,体积份额等数据由余弦界面与方形网格求交确定.使用 MOF-MMALE 进行数值模拟,4 个边界均设置为固壁边界条件,



(a) $t = 8$ 时刻与 VOF 结果的对比(局部)
(a) Comparison of MOF-MMALE (left) with VOF (right) for $t = 8$



(b) $t = 9$ 时刻与 VOF 结果的对比(局部)

(b) Comparison of MOF-MMALE(left) with VOF(right) for $t = 9$

图 11 重流体“钩状结构”放大图

Fig.11 Enlarged view of the ‘hook structure’ of the heavy fluid

时间步长固定为 0.001, 计算到最后时刻 $t_f = 10$. 从时刻 1 到时刻 10 的物质界面分别如图 9 所示, 从图中可以清晰地看出不稳定性发展的过程, 尤其是不稳定性发展起来后, 一些局部细节能够准确而锐利地重构.

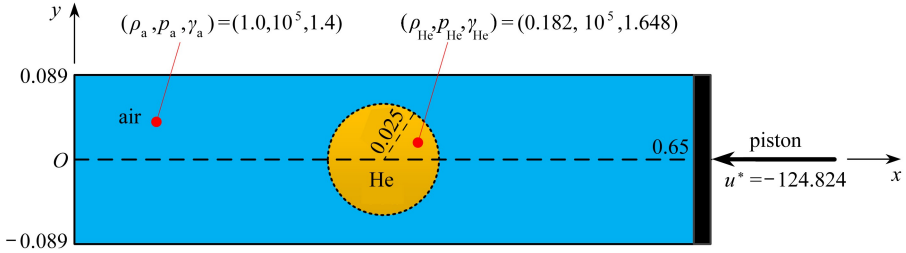
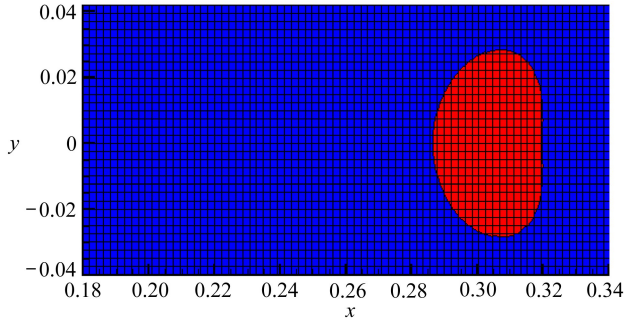


图 12 激波-气泡相互作用问题

Fig.12 The interaction of shock wave with a Helium bubble

图 10 中将 $t = 8$ 和 $t = 9$ 两个时刻的 MOF 重构结果与 front tracking 和 VOF 结果进行了比较. VOF 结果来自于文献[5], front tracking 来自 FronTier 计算的结果. front tracking 是一种比较精确的界面追踪算法, 这里将其作为参考解来检验 MOF 重构界面的精度和分辨率. 从图 10 可以看出, MOF 和 VOF 结果与 front tracking 从整体上来看均吻合得较好, 但在界面的局部细节



(a) $t = 800 \times 10^{-6}$

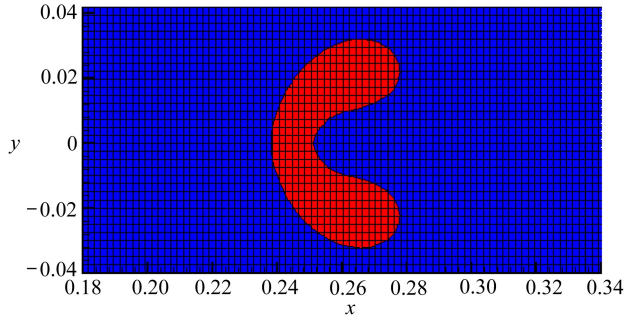
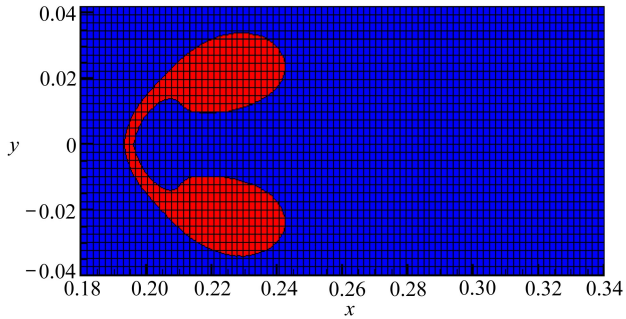
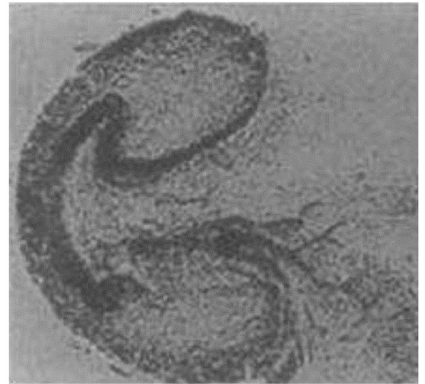
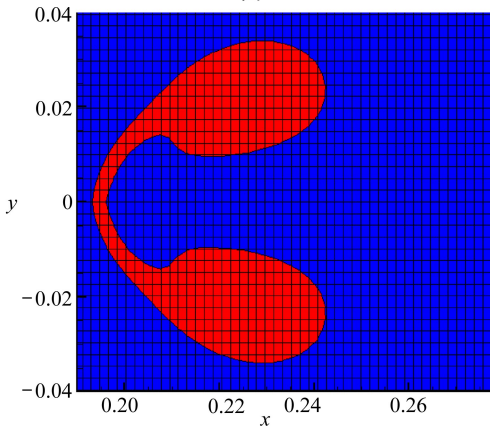
(b) $t = 1.100 \times 10^{-6}$ (c) $t = 1.342 \times 10^{-6}$

图 13 3 个不同时刻氦气泡的界面

Fig.13 Interface of the Helium bubble at 3 different instants

特征上 MOF 处理得要好一些.例如,在重流体“钉尖”卷起来之后,MOF 能够较为准确地捕捉到边缘的钩状结构,如图 11 所示.MOF 界面重构只在混合网格内部进行,不需要相邻网格的信息,这是其具有较好界面分辨率的原因所在.

图 14 $t = 1.342 \times 10^{-6}$ 时刻 MOF-MMALE 氦气泡界面(左)与实验结果(右)比较Fig.14 Comparison of the MOF-MMALE interface(left) with that of the experiment(right) for $t = 1.342 \times 10^{-6}$

3.4 激波与气泡相互作用问题

在计算区域 $[0, 0.65] \times [-0.089, 0.089]$ 充满空气,其中包含有一个氦气泡,气泡中心 $(x, y) = (0.32, 0)$, 半径 $r = 0.025$, 如图 12 所示.初始时刻所有物质均处于静止,空气状态 $(\rho_a, p_a, u_a, \gamma_a) = (1, 10^5, 0, 1.4)$, 氦气泡状态 $(\rho_{He}, p_{He}, u_{He}, \gamma_{He}) = (0.182, 10^5, 0, 1.648)$.在计算区域右

端,有一活塞以恒定速度 $u^* = -124.824$ 向左运动.通过 Rankine-Hugoniot 关系,可以求得激波速度 $D_c = -456.482$,在 $t_i = 668 \times 10^{-6}$ 时刻激波开始与氦气泡发生相互作用.

初始计算区域划分为 260×72 的均匀网格,在初始时刻就存在混合格网.右边界设置为常速度边界,其余 3 条边界设置为固壁,时间步长固定为 10^{-7} .由于该问题右边界是运动的,因此在网格重分时不能重映回初始网格,而是在右边界运动之后的区域上将网格进行重新均分,这样每个时间步结束后网格总是均匀分布的.取最终计算时间 $t_f = t_i + 674 \times 10^{-6} = 1.342 \times 10^{-6}$,3 个典型时刻的界面如图 13 所示.

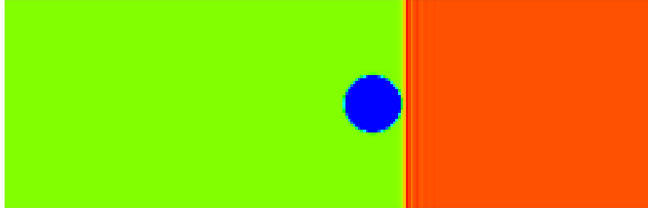
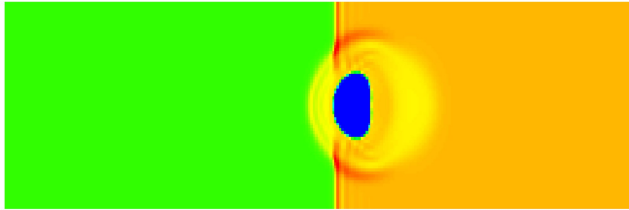
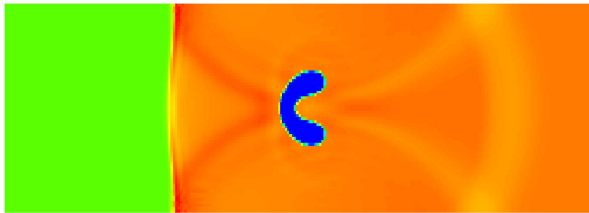
(a) $t = 668 \times 10^{-6}$ (b) $t = 800 \times 10^{-6}$ (c) $t = 1.100 \times 10^{-6}$ (d) $t = 1.342 \times 10^{-6}$

图 15 激波-气泡相互作用 4 个不同时刻的密度分布

Fig.15 Contour of density at 4 different instants for interaction of shock wave with the Helium bubble

将最后时刻氦气泡的数值模拟结果与实验结果^[19]进行了对比(图 14).容易看出,MOF-MMAL方法的结果与实验吻合得较好.下面图 15 是 4 个不同时刻密度分布图,分别对应激波-气泡刚开始相互作用时刻以及图 13 中 3 个时刻,从中可以看出激波与氦气泡相互作用存在复杂的物理过程,激波在气泡界面处的反射、折射、衍射、散射和涡结构的出现,导致物质界

面发生变形。

4 结 论

实现了耦合 MOF 界面重构的 MMALE 方法,形成 MOF-MMALE 方法,并应用于多介质大变形流动问题的数值模拟研究。通过 MOF-MMALE 数值结果与精确解、VOF 或实验结果比较,充分表明 MOF-MMALE 方法是模拟多介质大变形流动问题的有效手段,同时表明 MOF-MMALE 具有较高的界面精度和较好的界面分辨率。下一步工作将加强对网格重分算法的研究以及细化各种建模,增大网格规模,实现大规模并行计算。

参考文献(References):

- [1] 裴文兵, 朱少平. 激光聚变中的科学计算[J]. 物理, 2009, **38**(8): 559-568. (PEI Wen-bing, ZHU Shao-ping. Scientific computing for laser fusion[J]. *Physics*, 2009, **38**(8): 559-568. (in Chinese))
- [2] Kucharik M, Garimella R V, Schofield S P, Shashkov M J. A comparative study of interface reconstruction methods for multi-material ALE simulations[J]. *Journal of Computational Physics*, 2010, **229**(7): 2432-2452.
- [3] Benson D J. Computational methods in Lagrangian and Eulerian hydrocodes[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 1992, **99**(2/3): 235-394.
- [4] LUO Hong, Baum J D, Löhner R. On the computation of multi-material flows using ALE formulation[J]. *Journal of Computational Physics*, 2004, **194**(1): 304-328.
- [5] Galera S, Maire P H, Breil J. A two-dimensional unstructured cell-centered multi-material ALE scheme using VOF interface reconstruction[J]. *Journal of Computational Physics*, 2010, **229**(16): 5755-5787.
- [6] Breil J, Galera S, Maire P H. Multi-material ALE computation in inertial confinement fusion code CHIC[J]. *Computer and Fluids*, 2011, **46**(1): 161-167.
- [7] Anbarlooei H R, Mazaheri K. Moment of fluid interface reconstruction method in multi-material arbitrary Lagrangian Eulerian (MMALE) algorithms[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2009, **198**(47/48): 3782-3794.
- [8] Barlow A J. Challenges and recent progress in developing numerical methods for multi-material ALE Hydrocodes[R]. ICFD 25 Year Anniversary Conference, 2008.
- [9] Dyadechko V, Shashkov M J. Moment-of-fluid interface reconstruction[R]. Technical Report LA-UR-05-7571, Los Alamos National Laboratory, 2005.
- [10] 曾清红, 孙文俊, 勇珩. 柱坐标系下的 MOF 界面重构方法研究[J]. 水动力学研究与进展, 2012, **27**(6): 704-712. (ZENG Qing-hong, SUN Wen-jun, YONG Heng. MOF interface reconstruction method in cylindrical coordinates[J]. *Chinese Journal of Hydrodynamics*, 2012, **27**(6): 704-712. (in Chinese))
- [11] Schofield S P, Christon M A, Dyadechko V, Garimella R V, Lowrie R B, Swartz B K. Multi-material incompressible flow simulation using the moment-of-fluid method[J]. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 2010, **63**(8): 931-952.
- [12] Press W H, Teukolsky S A, Vetterling W T, Flannery B P. *Numerical Recipes in C++, the Art of Scientific Computing*[M]. 2nd ed. New York: Cambridge University Press, 2002.
- [13] Goncharov E A, Kolobyanin V Y, Sadchikov V V, Yanilkin Y V. Methods for computation of thermodynamic states of mixed cells in Lagrangian gas dynamics[R]. New Models and Hydrocodes for Shock Wave Processes in Condensed Matter, Dijon, France, 2006.

- [14] Caramana E J, Burton D E, Shashkov M J, Whalen P P. The construction of compatible hydrodynamics algorithms utilizing conservation of total energy[J]. *Journal of Computational Physics*, 1998, **146**(1): 227-262.
- [15] Caramana E J, Shashkov M J, Whalen P P. Formulations of artificial viscosity for multi-dimensional shock wave computations[J]. *Journal of Computational Physics*, 1998, **144**(1): 70-97.
- [16] Caramana E J, Shashkov M J. Elimination of artificial grid distortion and hourglass-type motions by means of Lagrangian sub-zonal masses and pressures[J]. *Journal of Computational Physics*, 1998, **142**(2): 521-561.
- [17] Barlow A J. A compatible finite element multi-material ALE hydrodynamics algorithm[J]. *International Journal for Numerical Methods in Fluid*, 2008, **56**(8): 953-964.
- [18] Loubere R, Shashkov M J. A subcell remapping method on staggered polygonal grids for arbitrary-Lagrangian-Eulerian methods[J]. *Journal of Computational Physics*, 2005, **209**(1): 105-138.
- [19] Haas J F, Sturtevant B. Interaction of weak shock waves with cylindrical and spherical gas inhomogeneities[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1987, **181**: 41-76.

MOF-MMALE Numerical Simulation of Multi-Material Large Deformation Flow Problems

ZENG Qing-hong, SUN Wen-jun

(*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics,
Beijing 100094, P.R.China*)

Abstract: In the numerical simulation of multi-material large deformation flow problems, the most important thing is tracking the material interfaces accurately while dealing with the large deformation of fluid simultaneously. The multi-material arbitrary Lagrangian Eulerian (MMALE) method coupled with the moment-of-fluid (MOF) interface reconstruction, was named a MOF-MMALE method and applied to multi-material large deformation flow problems. For the MOF-MMALE method, the mesh lines were allowed to cross the material interfaces and the mixed cells were introduced. In the mixed cells, the MOF interface reconstruction was used to determine the position and direction of the material interface. The numerical results of several typical examples, including the 2-material shock tube problem, the triple point problem, the Rayleigh-Taylor instability problem and the shock wave-Helium bubble interaction problem, show high accuracy and good resolution of the MOF-MMALE method, which is validated to be an effective way to simulate multi-material fluid flow problems with large deformation.

Key words: multi-material large deformation flow; MMALE; MOF interface reconstruction; mixed cell; closure model

Foundation item: The National Natural Science Foundation of China(11001026;11371068);
The National High-tech R&D Program of China (863 Program)
(2012AA01A303)