

Rayleigh-Taylor 不稳定性的 MAC 模拟*

张磊, 刘儒勋

(中国科学技术大学数学系, 合肥 230026)

摘要:利用 MAC 方法对 Rayleigh-Taylor 不稳定性进行了数值模拟. 主场方程采用变密度的不可压 Navier-Stokes 方程, 在 Euler 网格上进行求解. 为了克服 Euler 方法不能精确定位多介质交界面的问题, 引入了 Marker 点来追踪界面, 利用 Lagrange 方法计算界面的运动, 从而能精确的追踪出界面的位置.

关键词:Marker 点; Rayleigh-Taylor 不稳定性; 界面追踪

中图分类号:O351.1 **文献标识码:**A

AMS Subject Classifications (2000): 76E99(76D17; 76U05)

0 引言

近几十年来, 交界面的数值模拟由于其深刻的现实意义和广阔的应用前景而被广泛研究^[1]. 主要的界面数值模拟方法可以分为两大类: Lagrange 界面追踪方法^[2,3]和 Euler 界面捕捉方法^[4,5]. 前者能准确追踪交界面的变化, 间断处理无数值耗散, 但难于处理界面拓扑结构的变化, 且拓展到高维的算法极其复杂. 后者计算简单, 易于处理界面拓扑改变, 但不能精确的定位多介质的界面.

格子类(Cell Type)方法是一类重要的求解自由面和界面问题的数值模拟方法. 比较著名的格子类方法有 PIC(Particle in Cell)^[6]和 MAC(Marker and Cell)^[7]. MAC 方法把 PIC 方法中带有质量、动量和能量的质点改变为只具有坐标位置的示踪(Marker)点. 这样, MAC 方法所需要的内存比 PIC 方法大大减少, 更有使用价值. 自由面或物质界面可以通过 Marker 点的位置来确定. MAC 方法实际上是一种 Euler-Lagrange 混合方法^[8]. 一方面, 它采用固定的 Euler 网格, 所有流动量(如速度和压力)都是在该网格系下进行计算的. 另一方面, 对于格子内分布的 Marker 点, 采用 Lagrange 方法计算它们的运动, 从而能精确的反映每一个时刻自由面或物质界面的变形和运动. 由于网格是固定的, 因此不存在通常纯 Lagrange 方法会出现网格翻转和畸变等问题. 此外, 它又克服了通常 Euler 方法难以了解流动细节的缺点. 最初的 MAC 方法是将 Marker 点定义在流体内部来追踪流体的流动. 对于界面问题, 一般只关心界面的变化, 所以在本文中我们仅将 Marker 点定义在多介质的交界面上.

* 收稿日期: 2003-03-25

基金项目: 国家自然科学基金(10071083)和中国科学技术大学火灾科学国家重点实验室创新基金资助项目

作者简介: 张磊, 男, 1977年生, 硕士研究生. E-mail: zhl1217@ustc.edu

1950 年 Taylor 发表了第一篇系统研究 Rayleigh-Taylor 不稳定性的文章^[9], 之后一些学者相继涉足该领域. 早期工作大多采用线性或小扰动弱非线性方法, 限于对不稳定性前期阶段的研究. 对于不稳定性中后期的强非线性作用, 很难通过解析方法求解, 故数值计算占有重要的地位. 80 年代以来, 由于计算设备的改进, 对于 Rayleigh-Taylor 界面不稳定性的研究取得了很大进展^[10,11]. 本文对在重力场作用下的 Rayleigh-Taylor 不稳定性进行了数值模拟.

1 主场模型

两种密度不同的不相混的流体以一个交界面相隔, 重流体位于上方, 轻流体位于下方. 当界面受到一个微小的扰动, 在重力的作用下会产生不稳定的现象. 重流体以尖钉状渗入轻流体, 而轻流体以气泡状渗入重流体, 这种不稳定现象被称为 Rayleigh-Taylor 不稳定性.

对于 Rayleigh-Taylor 不稳定性, 这里采用的主场方程是结合密度和粘性系数对流方程的变密度的不可压流 Navier-Stokes 方程^[11].

$$U_t + (U \cdot \nabla)U = \frac{1}{\rho} (\nabla \cdot (2\mu \mathbf{D}) - \nabla p + F), \quad (1)$$

$$\nabla \cdot U = 0, \quad (2)$$

$$\rho_t + (U \cdot \nabla)\rho = 0, \quad (3)$$

$$\mu_t + (U \cdot \nabla)\mu = 0. \quad (4)$$

这里: U 是速度场, p 是压力, ρ 和 μ 分别是流体的密度粘性系数, F 是流体受到的外力, 在本文中是重力, \mathbf{D} 是粘性应力张量.

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla U + \nabla U^T).$$

主场方程的计算网格采用 MAC 网格. 压力、密度和粘性系数定义在网格中心, 而速度分别定义在网格的边界上. 主场方程需要先求解密度和粘性系数的对流方程, 然后将计算得到的下一个时间层的密度和粘性系数带入变密度的 Navier-Stokes 方程求解速度场. Navier-Stokes 方程采用 Projection 方法求解. 具体做法如下:

1.1 对流方程的求解

此处采用 LeVeque^[12]的方法求解对流方程. 这个方法采用守恒型的有限体积法. 首先将对流方程写成守恒形式:

$$q_t + \nabla \cdot (Uq) = 0 \quad (5)$$

采用等距剖分 $\Delta x = \Delta y = h$, 用 C_{ij} 表示第 (i, j) 个网格 $[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}] \times [y_{j-\frac{1}{2}}, y_{j+\frac{1}{2}}]$. 用 q_{ij}^n 表示第 n 时刻网格 C_{ij} 的网格平均,

$$q_{ij}^n \approx \frac{1}{h^2} \int_{C_{ij}} q(x, y, t_n) dx dy$$

在 $C_{ij} \times [t_n, t_{n+1}]$ 上对式(1)积分得到守恒型的有限体积格式:

$$q_{ij}^{n+1} = q_{ij}^n - \frac{k}{h} [F_{i+\frac{1}{2}} - F_{i-\frac{1}{2}} + G_{j+\frac{1}{2}} - G_{j-\frac{1}{2}}] \quad (6)$$

这里: k 为时间步长, $F_{i-\frac{1}{2}}$ 为网格左边界的数值流通量, $G_{j-\frac{1}{2}}$ 为网格下边界的数值流通量.

有限体积法就是构造这些数值流通量的值, 进而求出下一个时间步的网格平均. 如何构

造这些数值流通量是一个非常具有研究价值的问题. 通常在解的光滑区域, 一些高分辨率算法 (如 ENO, DG 等)^[13] 可以达到很高的精度. 而在间断和梯度变化较大的区域确只能保持一阶精度. 对于求解实际问题, 只需在间断的处理上尽可能的降低格式的数值耗散性和避免振荡, 不一定要追求高精度的算法. LeVeque 的方法是一个逐步修正的过程, 从最简单的迎风格式的数值流通量开始, 逐步增加一些修正项来修正数值流通量, 从而提高了解的数值精度. 对于间断和梯度变化较大的区域, 采用标准限制器来避免振荡.

1.2 Navier-Stokes 方程的 Projection 方法

首先将(2)式写成

$$\frac{(U^* - U^n)}{\Delta t} = -U^n \cdot \nabla U^n + \frac{1}{\rho} [\nabla \cdot (2\mu \mathbf{D}) + F] \quad (7)$$

通常的, 这样求得的速度场 U^* 并不是无散场, 需要将其投影到不可压速度场空间去. 考虑计算区域为 Ω 的压力是下面齐次 Neumann 边界条件的 Poisson 方程的解:

$$\left. \begin{aligned} \nabla \cdot \left(\frac{\nabla p}{\rho} \right) &= \frac{\nabla \cdot U^*}{\Delta t}, \quad \text{in } \Omega \\ n \cdot \nabla p &= -\frac{\rho}{\Delta t} (U^{n+1} - U^*) \cdot n = 0, \quad \text{on } \partial\Omega \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

这里 n 表示边界上的法向方向. 在 t_{n+1} 时刻新的速度场由如下公式得到

$$\frac{(U^{n+1} - U^*)}{\Delta t} = -\frac{\nabla p}{\rho} \quad (9)$$

根据以上条件, 可以知道 t_{n+1} 时刻的速度场满足基本的不可压无散条件:

$$\nabla \cdot U^{n+1} = 0 \quad (10)$$

1.3 初边值条件

对于二维 Rayleigh-Taylor 不稳定性, 根据 Chandrasekhar^[14] 的分析. 假设 $y = 0$ 为两种不相混和物质的交界面. 如果对交界面做一个波长为 k 的正弦扰动, 初值条件应该是界面扰动

$$y = \varepsilon \cos kx, \quad u = 0, \quad v = 0, \quad (11)$$

和速度扰动

$$y = 0, \quad u = \begin{cases} \varepsilon e^{-ky} \sin kx & y \geq 0 \\ -\varepsilon e^{ky} \sin kx & y < 0 \end{cases}, \quad v = \varepsilon e^{-k|y|} \cos kx, \quad (12)$$

线性叠加. 这里 ε 是扰动的强度. 为了简单, 在本文中仅采用界面扰动作为初值.

由于界面的初始扰动是一个波长为 k 的正弦扰动. 由三角函数的周期性, 可以知道扰动的水平宽度可以是无限大的. 在计算中只取半波长的宽度进行计算, 所以水平方向采用对称边界条件, 而计算区域的上下边界被认为是固壁. 本文采用 Harlow^[7] 提出的边界条件. 水平方向采用 free-slip 边界条件, 竖直方向采用 no-slip 边界条件.

对于压力, 由于每一步的压力都是通过求解 Poisson 方程(2)得到的, 所以不需要初值条件. 而在物理上也不需要给出压力的边界条件, 但在计算上需要边界值的处理, 为此才给出一个计算边界条件. 这里采用的是

$$\frac{\partial p}{\partial n} \Big|_{\Omega} = 0 \quad (13)$$

2 Marker 点的输运

本文主要考虑的是两种不相混流体的交界面的问题,只关心交界面随流场的变化情况.和以前的 MAC 方法不同,我们仅仅将 Marker 点定义在交界面上.

假设在二维正交差分网格中,在 t_n 时刻有一个 Marker 点 P_m 位于格子 $C_{i,j}$ 内,坐标和当时的速度为

$$P_m(x_m^n, y_m^n; u_m^n, v_m^n).$$

该示踪点的运动是随流而动的,在每个时间步,应当有全微商公式

$$\left. \begin{aligned} dx_m(t)/dt &= u(x, y, t) \\ dy_m(t)/dt &= v(x, y, t) \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

对上式在 $[t_n, t_{n+1}]$ 上积分可得

$$\left. \begin{aligned} x_m^{n+1} &= x_m^n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} u(x(t), y(t), t) dt \\ y_m^{n+1} &= y_m^n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} v(x(t), y(t), t) dt \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

可见,计算的关键是速度场 $U = (u(x, y, t), v(x, y, t))$ 在时间 $[t_n, t_{n+1}]$ 内在该示踪点附近的变化情况.根据数值积分的梯形公式,自然可以采用近似公式

$$\left. \begin{aligned} x_m^{n+1} &= x_m^n + (\Delta t/2)(u_m^n + u_m^{n+1}) \\ y_m^{n+1} &= y_m^n + (\Delta t/2)(v_m^n + v_m^{n+1}) \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

进行计算.

由于 MAC 网格的速度定义在网格边界上,对于 Marker 点,采用“面积加权”的方案来计算它的速度.由于速度的非一致配置,使得这种面积加权的计算公式变得很复杂,不同

坐标方向的速度加权方式也不统一.这里以 x 方向的速度 u 为例来说明,如图 1 所示. x 方向的速度 u 定义在网格的左右边界上,所以有加权公式:

$$u_m = (A_1 u_{i+\frac{1}{2}, j+1} + A_2 u_{i-\frac{1}{2}, j+1} + A_3 u_{i+\frac{1}{2}, j} + A_4 u_{i-\frac{1}{2}, j}) / \Delta x \Delta y \quad (17)$$

其中 $A_k (k = 1, 2, 3, 4)$ 的面积如图 1 所示.对于 y 方向的速度 v 用类似的计算公式.

3 简单的对流模型的数值模拟

为了检验方法的正确性,我们先用它来模拟一些简单的对流问题.从模拟的结果可以看出,这种方法可以精确的定位交界面的位置.

3.1 常速度平移流场

计算区域为 $[0, 2.5] \times [0, 2.5]$. 在 $[0, 0.5] \times [1, 2.5]$ 的区域给出三个同心模型:(a) 一个中空的边与坐标轴平行的同心正方形;(b) 一个中空的边与坐标轴成 26.67 度角的同心正方形;(c) 一个中空的同心圆.它们所在的主流场是一个简单均匀的平移速度场, $U = (2, -1)$. 这个模型是检验不同形状的界面在平移流场中的运动情况.下面是初值和 $t = 1$ 的结果.

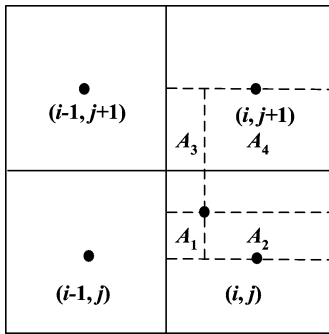


图 1 Marker 点速度的面积加权计算

Fig. 1 Area-weighted Method for velocity of Marker dots

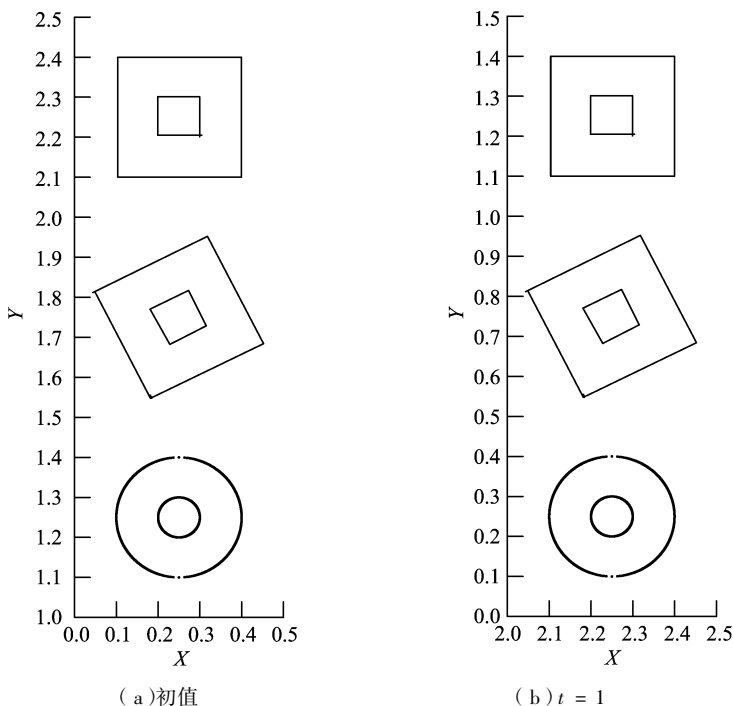


图 2 常数速度平移流场

Fig. 2 Constant velocity field

3.2 旋转流场

这是一个马蹄铁型的运动界面问题, 也被称作 Zaleska^[15]问题. 这个模型经常被用来检验标量的对流问题算法的好坏. 这里采用的运动界面形状如图 3 所示. 计算区域 $[0, 1] \times [0, 1]$. 圆心在 $(0.5, 0.5)$ 的, 半径 $r = 0.4$. 圆心垂直下方有一个方型缺口, 且对称, 宽度为 0.15.

主流场是一个旋转流场, 速度场为 $U = (u, v) = (-\pi(y - 0.5), \pi(x - 0.5))$ 下面是计算到 $t = 2$ 的结果, 每隔 0.5 一副.

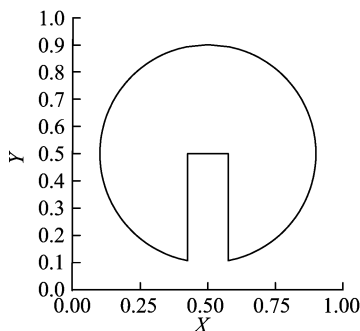


图 3 旋转流场的初始界面模型

Fig. 3 Initial model of Rotating velocity field

3.3 剪切流场

对于一个数值方法的检验, 仅仅用平移流场和旋转流场是不够的. 因为在上面两种流场中界面的拓扑结构不会发生改变. 由于这两种问题的速度场, 不仅有 $\nabla \cdot U = 0$, 而且 $\partial u / \partial x = 0$ 和 $\partial v / \partial y = 0$, 因而流体区域的形状在流动过程中不会发生变化. 而实际问题中流体的运动情况往往相当复杂. 所以此处用一个剪切流场来验证算法.

剪切流场的计算区域为 $[0, 1] \times [0, 1]$, 圆心在 $(0.5, 0.3)$, 半径 $r = 0.2$. 初始速度场为 $U = (u, v) = (-\pi \cos \pi(x - 0.5) \sin \pi(y - 0.5), \pi \sin \pi(x - 0.5) \cos \pi(y - 0.5))$.

下面是 $t = 1$ 和 $t = 2$ 的结果. 然后以 $t = 2$ 的结果作为初值, 将速度场反向. 再计算到 $t = 1$ 和 $t = 2$ 的结果.

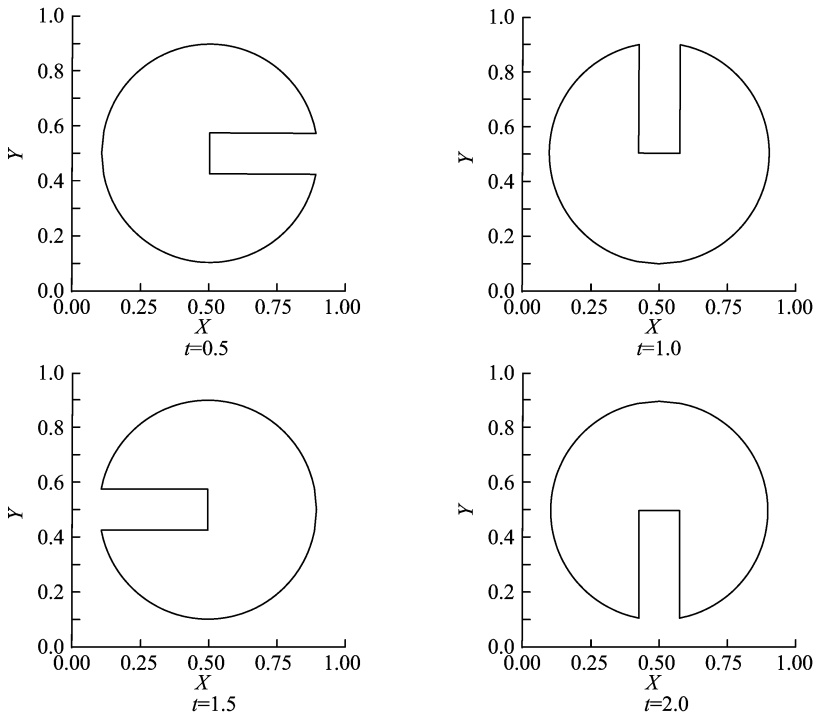


图 4 旋转流场的计算结果

Fig. 4 Rotating velocity field (Zalesak's test problem)

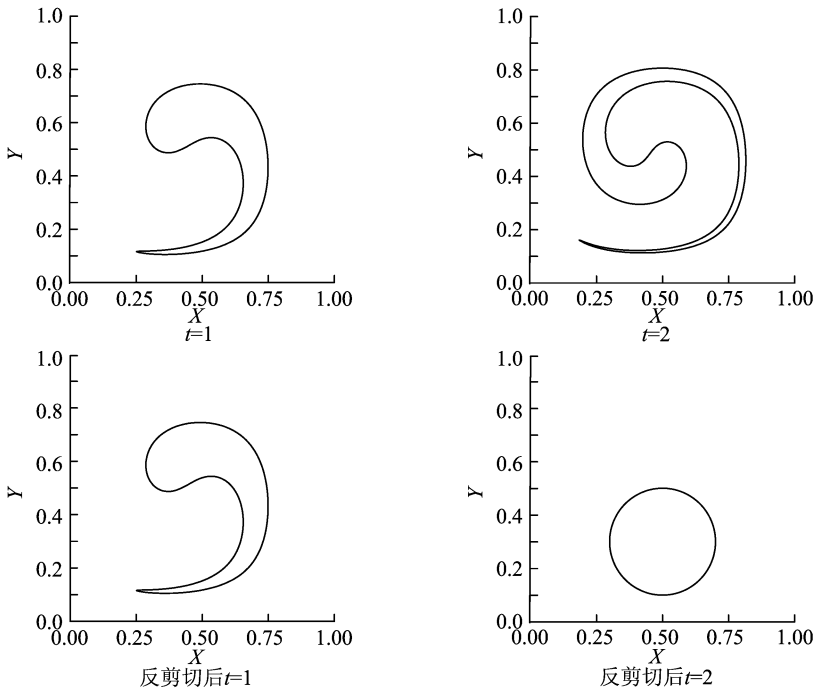


图 5 剪切流场的计算结果

Fig. 5 Results of Shearing velocity field

4 Rayleigh-Taylor 不稳定性

此处采用的模型计算区域为 $[0, 1] \times [0, 4]$, 界面位置为 $y = 2.0$, 上方为重流体, 密度 $\rho_1 = 3.0$, 下方为轻流体, 密度 $\rho_2 = 1.0$. 两种流体的粘性系数相等, $\mu_1 = \mu_2 = 0.02$ 在界面上给一个半波长为 1, 振幅为 0.02 的扰动. 重力加速度 g 为 -9.8 , 方向竖直向下.

图 6 给出的是 $t = 1.2$ 、 $t = 1.5$ 和 $t = 1.8$ 的结果.

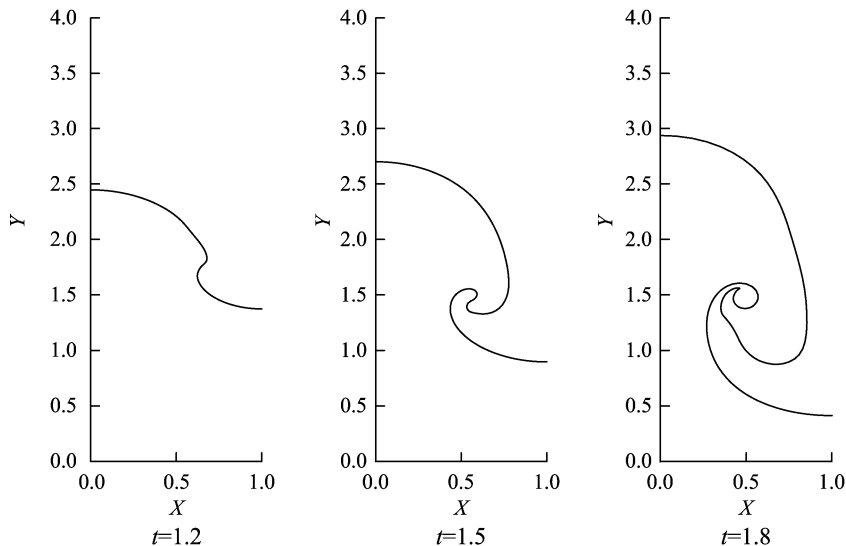


图 6 MAC 方法模拟 Rayleigh-Taylor 不稳定性

Fig. 6 Simulation of Taylor instability by MAC Method

Marker 点的初始位置由扰动的初值给出. 在计算中可看到, 初始位置在右边界的点随着流体的运动会越来越稀疏, 故这里采用非均匀的布点方式, 在右边界多布一些 Marker 点.

5 结论

从几个对流模型的数值模拟结果可以看出, 我们的方法能够精确的定位界面的位置. 如果采用 Euler 的界面捕捉方法模拟这些对流问题, 比如 VOF 方法, 在界面附近会出现数值耗散, 从而使界面跨越几个网格^[1], 这是不符合实际情况的. 而我们的方法采用 Lagrange 的方法计算界面的运动, 所以界面被限制在一个网格之内, 无数值耗散, 而且增加标记点可以使得在界面附近有子网格尺度的分辨率, 从而能够刻划比较精细的界面拓扑结构.

如果界面的拓扑结构发生改变, 比如卷起或破裂, 会使得 Marker 点过度密集或稀疏, 这就需要对 Marker 点进行重布. 这需要一些插值方法来确定新加入的标记点的位置. 对于更加复杂的界面拓扑结构的变化, 例如两个气泡的融合. 还需要考虑标记点属于哪一个气泡. 这些都增加了方法的复杂度.

Marker 点运动的计算是独立于主场方程的求解的, 所以主场方程所求得的速度场对于 Marker 点能否精确定位界面有着决定性的影响, 而且近年来的交界面的数值模拟大多采用带有界面对主场模型反馈效应的“耦合型”主场模型^[5], 这也需要对 Marker 点做一些插值来逼近一些描述界面曲线的几何量, 如界面法向, 曲率半径等.

参 考 文 献

- [1] 刘儒勋,王志峰. 数值模拟方法和运动界面追踪[M]. 合肥:中国科学技术大学出版社, 2001.
- [2] Unverdi S O and Tryggvason G. A front-tracking method for viscous, incompressible multi-fluid flows[J]. J Comput. Phys. , 1992, 100 (1):25-37.
- [3] Chern I L, Glimm J, McBryan O, Plohr B, Yavin S, Front tracking for gas dynamics[J]. J Comput. Phys. , 1986, 62:83-110.
- [4] Hirt C W and Nickolls B D. Volumn of fluid (VOF) method for dynamics of free boundaries [J]. J Comput. Phys. , 1981, 39:201-225.
- [5] Gueyffier D, Li J, Nadim A, Scardovelli R and Zaleski S. Volume-of-fluid interface tracking with smoothed surface stress methods for three-dimensional flows [J]. J Comput. Phys. , 1999, 152(2):423-456.
- [6] Harlow F H and Welch J E. The Particle-in-Cell Computing Method in Fluid Dynamics. Methods in Computational Physics, volume 3 [M]. New York: Academic Press, 1965. 319.
- [7] Harlow F H, Welch J E. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible[J]. Flow of Fluid with Free Surface Phys Fluids. , 1965, 8:2182-2189.
- [8] 忻孝康,刘儒勋,蒋伯诚. 计算流体动力学 [M]. 长沙:国防科技大学出版社, 1989.
- [9] Taylor G I. The Stability of Liquid Surface When Accelerated in Direction Perpendicular to Their Planes [M]. London, 1950, A201:192-196.
- [10] Guermond J L, Quartapelle L. A projection FEM for variable density incompressible flows [J]. J Comput. Phys. , 2000, 165:167-188.
- [11] Bell J B, Marcus D L. A second-order projection method for variable-density flows[J]. J Comput. Phys. , 1992, 101:334-348.
- [12] LeVeque R J. High-resolution conservative algorithms for advection in incompressible flow [J]. SIAM J Numer Anal. , 1996, 33:627-665.
- [13] 刘儒勋,舒其望. 计算流体力学的若干新方法 [M]. 北京: 科学出版社, 2003.
- [14] Chandrasekhar S. Hydrodynamic and Hydro-magnetic Stability[M]. London: Oxford Clarendon Press. 1961, 654.
- [15] Zalesak S T. Fully mulit-dimensional flux corrected transport algorithms for fluid flow[J]. J Comput. Phys. , 1979, 31:335-362.

Numerical Simulation for Rayleigh-Taylor Instability by MAC Method

ZHANG Lei, LIU Ru-xun

(Department of Mathematics, USTC, Hefei 230026, China)

Abstract: MAC method for simulating Rayleigh-Taylor instability is proposed. Variety density Navier-Stokes equation is used as the control equation, solved on Euler meshes. Marker points are used to track the interface, since the Euler method is not accurate at localizing the interface. The movement of the interface is calculated through Lagrange methods. So that the interface can be located accurately.

Key words: Marker points; Rayleigh-Taylor instability; interface tracking