

目 次

- 极端冲击下激波诱导附加电场加速金属/气体界面的经验模型 张嘉炜, 黄生洪
“反尖端”界面不稳定性数值计算分析
..... 王 涛, 汪 兵, 林健宇, 柏劲松, 李 平, 钟 敏, 陶 钢
微观尺度下金属/气体界面 RM 不稳定性自相似现象的分子动力学模拟
..... 丁 雨, 黄生洪
基于 PPM 的界面压缩方法研究
..... 陈 芳, 李 平, 刘 坤, 柏劲松, 林健宇, 季路成

《高压物理学报》2019 年主题专刊名录 《高压物理学报》编辑部



官方网站: www.gywlxb.cn
官方邮箱: gaoya@caep.cn
联系电话: 0816-2490042



《高压物理学报》2019年主题专刊名录

- ❖ 高压物性实验研究
- ❖ 高压物性的计算与模拟
- ❖ 高压合成新材料
- ❖ 高压地球科学
- ❖ 高压实验技术
- ❖ 高压下材料动态响应的计算与模拟
- ❖ 高压下材料动态响应实验研究
- ❖ 脆性材料的动态响应
- ❖ 界面不稳定性
- ❖ 高压科学应用——炸药起爆及安全性
- ❖ 高压科学应用——水下爆炸
- ❖ 高压科学应用——侵彻与防护
- ❖ 高压科学应用——气相爆炸

★ 获取地址：<http://www.gywlxb.cn/topics>

极端冲击下激波诱导附加电场加速 金属/气体界面的经验模型

张嘉炜, 黄生洪

(中国科学技术大学近代力学系材料力学行为和设计重点实验室, 安徽 合肥 230026)

摘要:采用基于电子力场势函数的分子动力学方法, 模拟了极端冲击压缩($22.50\sim78.75\text{ km/s}$)下 Li/H_2 界面的演化过程。计算结果表明, 在极端冲击压缩条件下, 激波压缩导致物质电离, 由于电子和离子的扩散差异, 激波附近出现电荷分离区, 进而诱导出现附加电场。通过沿激波传播方向进行一维电荷统计和理论分析, 发现在激波强度一定的情况下, 随着激波的运动, 电荷分离区的强度和宽度在整个过程中基本保持恒定, 与激波强度正相关; 进一步对电荷分布进行积分, 得到由电荷分离引起的附加电场沿冲击波传播方向的变化。统计分析了附加电场影响下金属/气体界面附近金属侧物质产生的加速度随时间的变化, 发现附加加速过程呈脉冲形态, 满足Rayleigh模型。通过计算拟合, 得到该模型的关键参数与初始冲击加载速度的关系, 最终获得电离诱导附加电场引起界面金属侧物质附加加速度的经验计算公式。

关键词: 极端条件; 电荷分离; Richtmyer-Meshkov 不稳定性; 加速度; 电场; 分子动力学

中图分类号: O521.2; O357.4

文献标识码: A

当冲击波通过两种不同物质的界面时, 界面扰动在冲击加载作用下会增长演化, 即Richtmyer-Meshkov(RM)不稳定性^[1]。RM不稳定性是目前惯性约束核聚变研究的关键基础问题, 其挑战主要来源于极端热力学条件(压力远大于100 GPa, 温度远高于 10^4 K)^[2-3]。目前, 尚未发现针对极端条件的新RM不稳定性理论模型, 进行相关实验需要高昂的费用, 并且数据测量极为困难, 所获数据十分有限。

数值模拟方面, 对于温稠密物质及高密度等离子体, 常规的流体动力学模拟缺少有效的模型和输运参数。不过, 从原子尺度, 采用分子动力学的建模和模拟方法正成为一种有效技术手段。这类方法从描述原子或核子的基本相互作用势出发, 不要求预设任何宏观模型、本构关系、宏观输运系数等, 通过计算大量原子或核子的运动, 直接模拟各种能量密度范围内的物质运动, 可以涉及非平衡态、非连续效应、多组分/多相效应、电离以及与材料混合相关的随机反应等各种复杂物理机制。目前, 在极端热力学条件下材料混合问题的理论研究中已经普遍采用分子动力学方法进行计算^[4-8], 特别是基于量子力学方程的第一性原理分子动力学方法(First Principles Molecular Dynamics, FPMD)^[9-19], 且正有计划地发展大规模分子动力学程序^[4]。然而, 利用经典势函数的分子动力学模拟受到势函数的限制, 一般只能模拟常规条件下或非电离状态下的RM不稳定性; 基于密度泛函理论的QMD(Quantum Molecular Dynamics)方法可以计算极端条件下的物性参数和状态方程, 但是由于计算量巨大, 无法直接模拟RM不稳定过程。Su等^[20-21]提出将单电子显式处理成波包(Wave Packet, 有位置, 大小可变)的模型, 从而发展出一种新的具有第一性原理特质的分子动力学方法——电子力场(Electron Force Field, eFF)分子动力学。近年来, 该方法得到不断发展, 已经具备处理 10^6 量级离子和电子及长时间尺度的能力^[22]。

* 收稿日期: 2018-07-31; 修回日期: 2018-09-04

基金项目: 国家自然科学基金(U1530125); 科学挑战专题(TZ2016001)

作者简介: 张嘉炜(1994—), 男, 硕士研究生, 主要从事界面不稳定性分子动力学研究.

E-mail: jwzhang9@mail.ustc.edu.cn

通信作者: 黄生洪(1974—), 男, 博士, 副教授, 主要从事极端冲击动力学研究. E-mail: hshnpu@ustc.edu.cn

近期本研究团队利用该方法^[23-24], 从微观角度开展了不同热动力学条件下(3~30 km/s 高速冲击加载)金属锂和气态氢材料混合的分子动力学数值模拟, 结果发现极端加载条件下 RM 不稳定性的演化呈现新的特征, 即振幅增长的线性段加长以及非线性段振幅增长速度高于无电离效应工况, 这一结果得到了 Nova 实验结果^[25-26]的印证。其机理在于: 极端条件下激波压缩导致物质电离, 由于电子和离子扩散存在差异, 电子将扩散到激波之前, 形成电荷分离区, 进而诱导产生附加电场, 由附加电场引起的界面物质附加加速度会显著影响界面演化。为深入理解极端条件下 RM 不稳定性的演化特征, 特别是附加电场对界面物质的加速效应, 本研究继续采用 eFF MD 方法, 模拟强激波作用下电荷分离情况, 对电荷沿激波和界面运动方向的分布进行统计分析, 得到电荷分离区强度和宽度随激波强度变化的规律, 并进一步获得附加电场影响下界面附近金属侧物质产生的加速度, 通过拟合, 获得附加电场引起的界面附加加速度的计算模型。

1 方法与模型

1.1 MD 方法

MD 方法的本质是通过牛顿第二定律求解每个原子(或分子)位置、速度、受力等基本物理量随时间的变化, 其控制方程为

$$\mathbf{F}_i = -\nabla_i U = -\left(\frac{\partial}{\partial x_i} \mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y_i} \mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial z_i} \mathbf{k}\right) U \quad (1)$$

式中: i 代表粒子编号; \mathbf{F}_i 为系统中其他粒子施加在粒子 i 上的力的总和, 可以由粒子间的势函数 U 求梯度得到。势函数的表达形式为

$$U = U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_n) \quad (2)$$

式中: \mathbf{r}_i 为第 i 个原子的坐标。获得施加在粒子 i 上的力之后, 它相应的加速度 \mathbf{a}_i 、速度 \mathbf{v}_i 以及位置都可以由下列力学式计算得到

$$\begin{cases} \mathbf{F}_i = m_i \mathbf{a}_i \\ \mathbf{v}_i = \mathbf{v}_i^0 + \mathbf{a}_i t \\ \mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i^0 + \mathbf{v}_i^0 t + \frac{1}{2} \mathbf{a}_i t^2 \end{cases} \quad (3)$$

式中: m_i 为粒子质量, t 为时间。物质其他相关的物理量, 如体积、温度、压力等, 均可以通过数值统计方法得到。

1.2 电子力场势函数

在目前的研究中, 包含电子力场势函数的模型将原子核处理成点电荷^[20-21], 而将电子处理成满足高斯分布的波包。整个系统的能量是由原子核位置 R 、电子位置 r 和相对距离 s 构成的函数, 表达形式如下

$$U(R, r, s) = E_{\text{NN}}(R) + E_{\text{Ne}}(R, r, s) + E_{\text{ee}}(r, s) + E_{\text{KE}}(r, s) + E_{\text{pauli}}(\uparrow\downarrow, s) \quad (4)$$

$$E_{\text{NN}} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i < j} \frac{Z_i Z_j}{R_{ij}} \quad (5)$$

$$E_{\text{Ne}} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{Z_i}{R_{ij}} \text{erf}\left(\frac{\sqrt{2}R_{ij}}{s_j}\right) \quad (6)$$

$$E_{\text{ee}} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} \text{erf}\left(\frac{\sqrt{2}r_{ij}}{\sqrt{s_i^2 + s_j^2}}\right) \quad (7)$$

$$E_{\text{KE}} = \frac{\hbar^2}{m_e} \sum_i \frac{3}{2s_i^2} \quad (8)$$

$$E_{\text{pauli}} = \sum_{\sigma_i=\sigma_j} E(\uparrow\downarrow)_{ij} + \sum_{\sigma_i \neq \sigma_j} E(\uparrow\downarrow)_{ij} \quad (9)$$

式中: E_{NN} 表示原子核之间的库仑作用力, E_{Ne} 表示原子核与电子之间的库仑力, E_{ee} 表示电子之间的库仑力, 这3项能量与经典分子动力学下的相一致; E_{KE} 表示电子的动能, E_{pauli} 表示 Pauli 排斥能, 这两项能量反映了量子影响; ϵ_0 和 σ 是经典 Lennard-Jones 势函数下的参数; Z 表示原子核的带电量; R_{ij} 和 r_{ij} 表示相互作用的距离; m_e 为电子质量, h 为普朗克常数。单个电子被处理成满足高斯分布的波包, 因而波包的位置 x 和大小 s 会随时间变化。按照运动和静止体系, 其波函数形式为

$$\psi(r) \propto \exp\left[-\left(\frac{1}{s^2} - \frac{2P_s}{s} \frac{i}{h}\right)(r-x)^2\right] \exp\left(\frac{i}{h} \mathbf{P}_x \cdot \mathbf{r}\right) \quad (10)$$

式中: P_x 和 P_s 分别表示高斯波包的平动动量和径向伸缩动量。将(10)式代入时间相关的薛定谔方程, 得到简化 Hamiltonian 的运动方程

$$\dot{x} = \frac{dx}{dt} = \frac{P_x}{m_e} \quad (11)$$

$$\dot{P}_x = \frac{dP_x}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x} \quad (12)$$

$$\dot{s} = \frac{ds}{dt} = \frac{4}{3} \frac{P_s}{m_e} \quad (13)$$

$$\dot{P}_s = \frac{dP_s}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial s} \quad (14)$$

式中: m_e 为电子质量, V 为系统势能。这些方程说明电子的位置和大小遵循经典分子动力学, 并且独立地随时间变化。因此, eFF 方法可以用来模拟长时间、大空间尺度各种极端条件下材料的非绝热动力学过程。

1.3 计算模型

如图1所示, 计算模型的大小为 $123.760 \text{ nm} \times 3.536 \text{ nm} \times 1.768 \text{ nm}$ ($x \times y \times z$), 由金属 Li 和气体 H_2 组成。Li 和 H_2 之间的界面为光滑平面, 无初始扰动。于是, 冲击压缩过程可近似成一维流动。 e^- 表示电子, ± 1 代表电子的自旋方向。

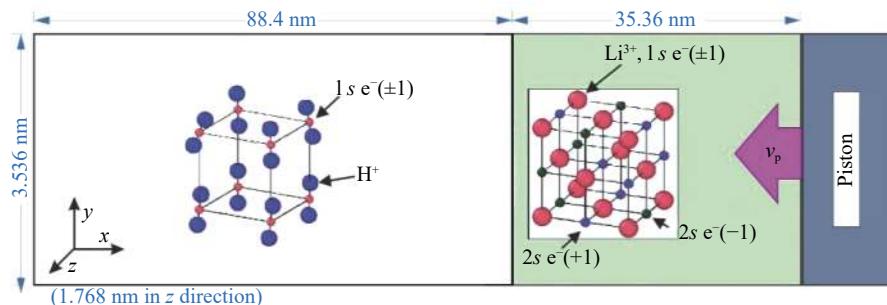


图1 计算模型

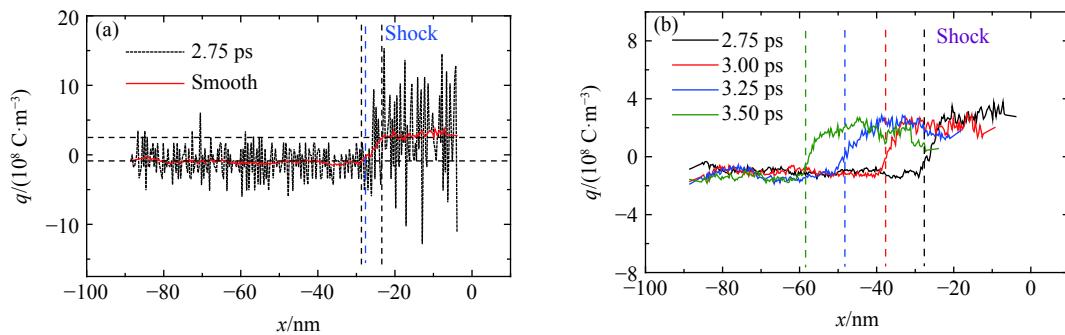
Fig. 1 Computational model

界面冲击激波首先由 Li 区域右侧刚性壁模拟活塞向 $-x$ 方向以恒速 v_p 冲击压缩产生。当它经过界面位置时, 会形成向左的透射激波和向右的反射激波, 电荷分离将在此冲击压缩过程中产生。

2 结果与讨论

2.1 电荷分离

为了清晰地看到电荷分离情况, 选取初始压缩速度 $v_p=22.50 \text{ km/s}$ 的工况, 如图2(a)所示。可见, 强

图 2 $v_p=22.50 \text{ km/s}$ 时电荷密度分布一维统计及其随时间的变化Fig. 2 1D statistic of charge density distribution for $v_p=22.50 \text{ km/s}$ case and its patterns at different moments

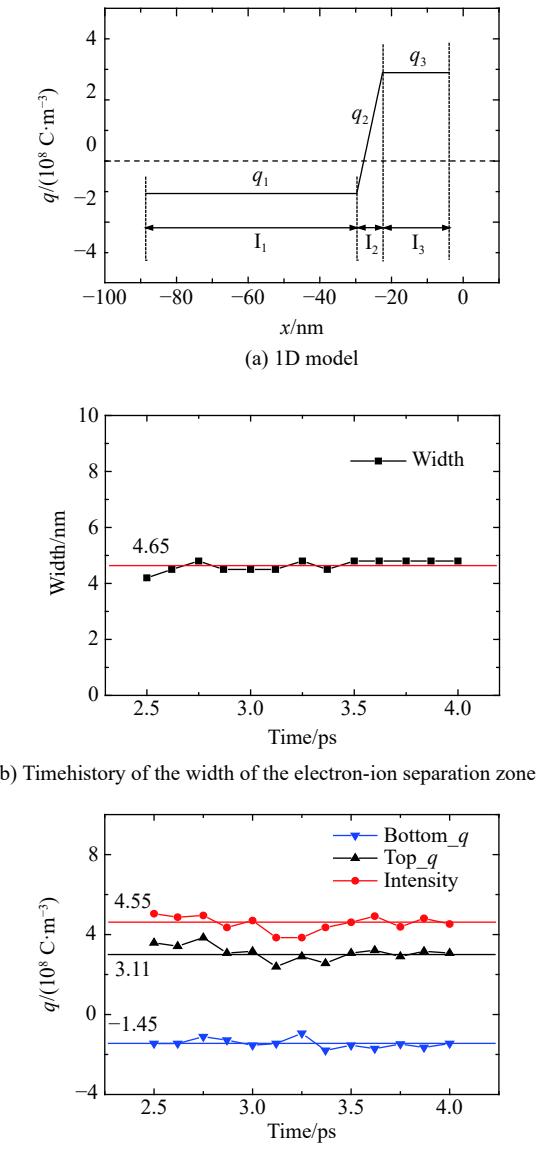
激波冲击运动过程中, 激波压缩产生的高温导致电离, 电离出自由电子和离子。由于激波压缩区的密度高, 电子和离子浓度均高于激波未到达区。根据等离子体动力学, 电子和离子将向低浓度区域扩散。由于电子质量极小, 碰撞截面小, 其扩散速度极高, 且未电离原子对其扩散阻力小, 因此电子很快跨越激波, 扩散到激波未到达区; 而离子与原子的质量基本相同, 且碰撞截面大, 扩散速度低, 受其他原子碰撞后扩散阻力大, 无法跨越激波。因此, 在激波附近必然出现电子-离子分离区。一旦出现电子-离子分离区, 等离子体的空间局部中性电场将不复存在, 而随着空间电荷的分布出现局部附加电场。附加电场的建立将阻止电子进一步向低电荷密度区扩散, 直至达到动态平衡为止, 最终形成如图 2(a)所示的台阶状电荷分布状态。

图 2(b)进一步显示了电荷密度随时间的变化。可见, 电荷分离现象伴随整个激波压缩过程, 且随着激波向前运动而移动。这是因为运动激波不断压缩导致其所经过区域物质电离, 电子和离子不断扩散, 建立附加电场, 并形成新的扩散平衡。可以确定, 电荷分离区将伴随运动激波, 以相同的速度运动。

2.2 电荷分离区的强度与宽度

根据图 2 所描述的电荷一维分布曲线, 构建了如图 3(a)所示的一维电荷分布模型。它由 3 部分构成: 区域 I_1 电荷量为负, 表示电子分布区域; 区域 I_3 电荷量为正, 表示离子区域; 中间的区域 I_2 是从负(电子区域)到正(离子区域)的过渡区, 可近似地看成线性分布, 它随着激波不断向激波运动方向(x 负方向)移动。

过渡区宽度定义为电荷分离区的宽度, 过渡区两端的电荷密度差($q_3 - q_1$)定义为电荷分离区



(c) Timehistory of the intensity of the electron-ion separation zone

图 3 电荷密度分布一维模型以及电荷分离区宽度和强度的时间历程 ($v_p=22.50 \text{ km/s}$)Fig. 3 1D model of charge density distribution and time histories of the width and intensity of the electron-ion separation zone for $v_p=22.50 \text{ km/s}$

的强度。图3(b)和图3(c)分别显示 $v_p=22.50 \text{ km/s}$ 的工况下电荷分离区宽度和强度随时间变化的曲线。可以看出,这两个新定义的量在激波运动过程中基本保持恒定,宽度维持在4.65 nm左右,强度在 $4.55 \times 10^8 \text{ C/m}^3$ 附近波动。这是由于:分离区诱导的附加电场抑制了电子和离子的进一步扩散,达到一种局部平衡状态。而扩散动力来自于电离强度,当压缩激波强度一定时,其波后温度和压力一定,电离强度趋于恒定,则扩散动力恒定,因而分离区的强度和宽度必然趋于恒定。

表1 进一步统计了其他加载速度下电荷分离区的强度和宽度数据。可见,随着冲击速度的增加,电荷分离区的宽度和强度持续增加。这是因为随着冲击速度的增加,激波压缩强度增加,电离强度增加,分离区宽度和强度自然相应增加。不过从增加的程度来看,宽度增加程度较小,而强度增加程度较高,且均呈现非线性增加特征。

2.3 附加电场对界面附近金属物质的附加加速度模型

2.3.1 附加电场和附加加速度

如前所述,在极端加载条件下,电荷分离会诱导附加电场的产生。本研究根据模拟结果构建了如图3(a)所示的一维电荷分布模型。为验证该模型的合理性,对模型进行电势积分获得一维分布的电场,如图4中红实线所示。

由于电荷分离,激波前后的物质不再呈中性状态,而是分别带部分负电和正电。在附加电场中必然产生加速度,其计算表达式如下

$$a = \frac{\rho_q E}{\rho_m} \quad (15)$$

式中: E 为附加电场强度, ρ_q 和 ρ_m 分别为单位体积下的物质带电量和物质密度,可通过分子动力学模拟结果的统计得到。

同时根据积分获得的一维分布的电场,计算各处带电物质获得的一维加速度分布,如图4中蓝色实线所示。图4还给出了根据eFF MD模拟结果一维统计获得的电场分布(红色虚线)和物质加速度分布(蓝色虚线),可见二者基本吻合。说明本研究建立的一维电荷分布模型基本合理。

2.3.2 金属/气体界面附近金属物质的加速度模型

由于RM不稳定性的主要演化特征表现为界面物质扰动的振幅增长及物质混合,因此在极端条件下,激波诱导电荷分离导致附加电场的产生,进而引起界面物质的附加加速效应,可能显著影响界面演化。为深入理解极端条件下RM不稳定性演化特征,特别是附加电场对界面物质的加速效应,对金属/气体界面附近金属侧物质(Li 和 H_2 物质的量之比 $0.6 \sim 0.9$,厚度在 $0 \sim 2.0 \text{ nm}$ 区间)的加速度进行跟踪统计(以激波到达界面位置为统计起点),获得了不同冲击加载速度 v_p 下界面附近金属物质的附加加速度随时间变化曲线,如图5所示。图5中虚线为根据eFF MD模拟结果统计分析获得,由于电子和离子的动态运动效应,统计值有一定涨幅落差,因此虚线呈现一定的振荡特征。对结果采用Rayleigh模型((16)式)进行拟合,如图5中红实线所示。综合来看,可以获得以下几点认识。

(1) 界面附近金属物质获得的加速度呈脉冲形式。当激波刚到达界面位置时,电荷分离区跨越气/固界面,界面附近金属侧物质处于分离区中心区域,净电荷接近零;尽管此时分离区电场强度较高,但目

表1 不同冲击加载速度下分离区的宽度和强度统计

Table 1 Statistics of the width and intensity of the electron-ion separation zone at different impact velocities

$v_p/(\text{km}\cdot\text{s}^{-1})$	Width/nm	Intensity/ $(10^8 \text{ C}\cdot\text{m}^{-3})$
22.50	4.65	4.55
45.00	6.40	6.11
67.50	8.65	10.25

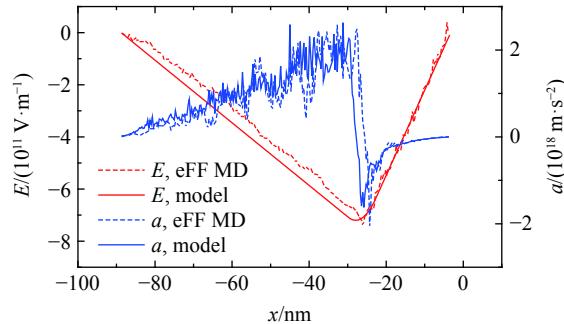


图4 一维附加电场和附加加速度($t=2.75 \text{ ps}, v_p=22.50 \text{ km/s}$)的eFF MD统计分析结果和基于1D电荷密度模型的计算结果对比

Fig. 4 Comparison of 1D extra electric field and extra acceleration of materials between results of eFF MD statistics and 1D charge density model ($t=2.75 \text{ ps}$ of $v_p=22.50 \text{ km/s}$ case)

标区受到的电场力较弱,加速度较低。随着激波往前推进,电荷分离区亦往前推进,分离区的电荷扩散处于动态平衡,目标区的净电荷逐渐偏正,并迅速向峰值增加;此时目标区受到的电场力开始增强,加速度迅速向峰值挺近,形成脉冲尖峰。随后,由于激波速度大于界面运动速度,随着激波继续向前推进,电荷分离区逐渐远离界面;此时目标区还带有较强的正电荷,但该区电场强度迅速衰减,对应的加速度也迅速衰减,形成完整的加速脉冲效应。

(2) 随着冲击加载速度的增加(从 22.50 km/s 增加至 78.75 km/s),目标区域的峰值加速度迅速提高(从 $1.7 \times 10^{17} \text{ m/s}^2$ 增加至 $1.2 \times 10^{18} \text{ m/s}^2$),同时脉冲持续时间逐渐减小(从 1.5 ps 降至 1.0 ps)。这是因为随着冲击加载速度的提高,压缩程度增强,电离强度增加,电荷分离区强度相应提高,导致峰值加速度提升;但同时激波运动速度加快,激波跨越界面的时间相应缩短,脉冲持续时间自然有所降低。

(3) 需要指出的是,曲线后期呈现较大幅度的振荡,这是因为激波到达左侧边界发生了 Re-shock 现象,Re-shock 导致电荷分离呈现较大幅度的振荡。不过这一过程不是本研究关注内容,在此不作讨论。

本研究拟合所采用的模型公式为

$$a(t) = a_{\max} e^{1/2} \frac{t}{\tau_{\text{rise}}} \exp\left(-\frac{t^2}{2\tau_{\text{rise}}}\right) \quad (16)$$

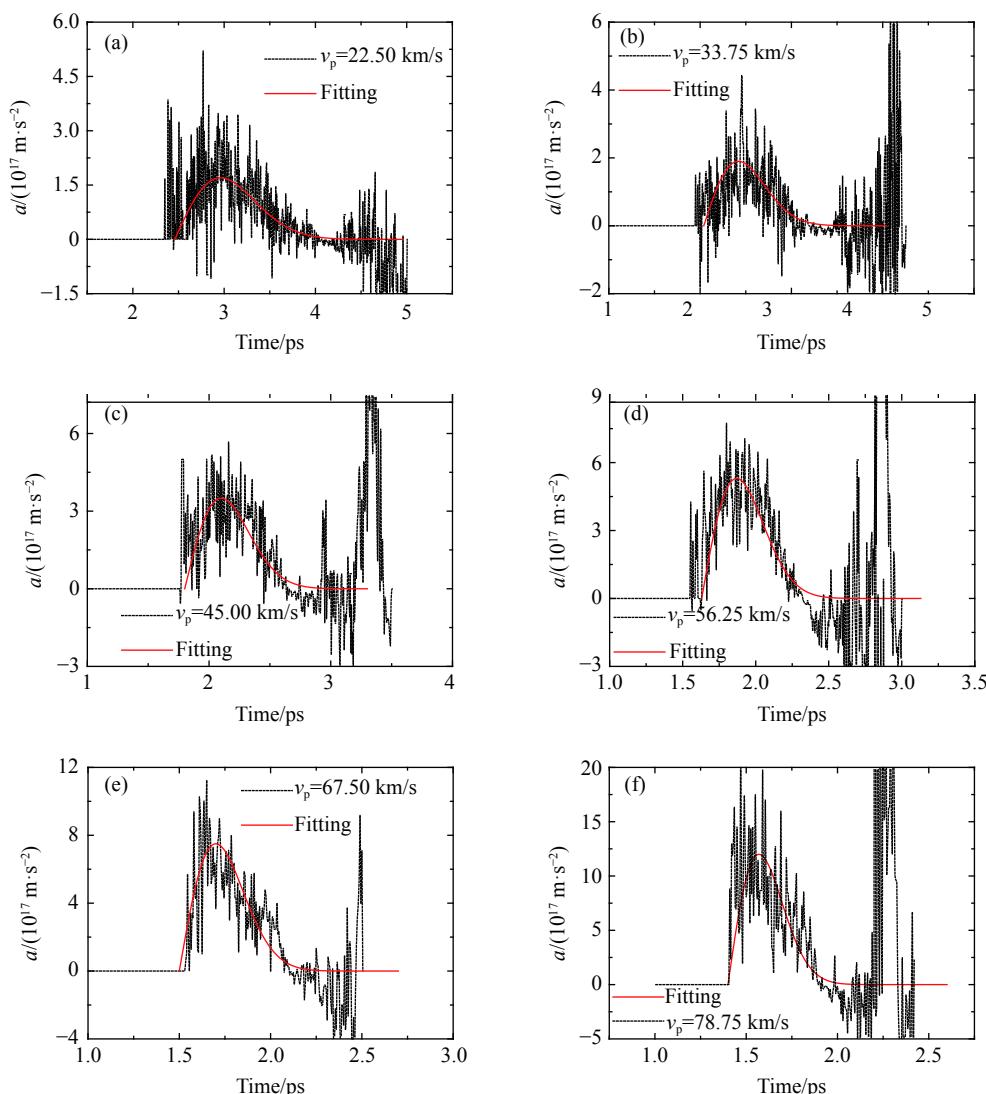


图 5 不同冲击加载速度 v_p 下界面金属侧物质附加加速度的变化历程

Fig. 5 Acceleration time histories of material located at the metal side of the interface at different v_p

式中: a_{\max} 和 τ_{rise} 分别代表加速度峰值和上升时间, 拟合参数如表2所示, 拟合曲线如图6所示。

从图6中可以明显看出 a_{\max} 和 τ_{rise} 分别随初始加载速度呈指数上升和指数下降趋势。这反映了拟合模型的合理性, 即峰值加速度及脉冲上升时间与冲击强度的非线性关系。进一步对两个参数进行拟合, 得到如下表达式

$$a_{\max} = 6.233 \times 10^{16} \times e^{0.03744v_p} \quad (17)$$

$$\tau_{\text{rise}} = 0.773 \times 10^{-0.02035v_p} \quad (18)$$

将(17)式和(18)式代入(16)式, 可以获得界面附近金属侧物质受到激波压缩电离诱导形成附加电场的加速度经验公式

$$a(t, v_p) = 6.233 \times 10^{16} \times e^{0.03744v_p + 0.5} \times \frac{t}{0.773 \times 10^{-0.02035v_p}} \times \exp\left(-\frac{t^2}{1.547 \times 10^{-0.02035v_p}}\right) \quad (19)$$

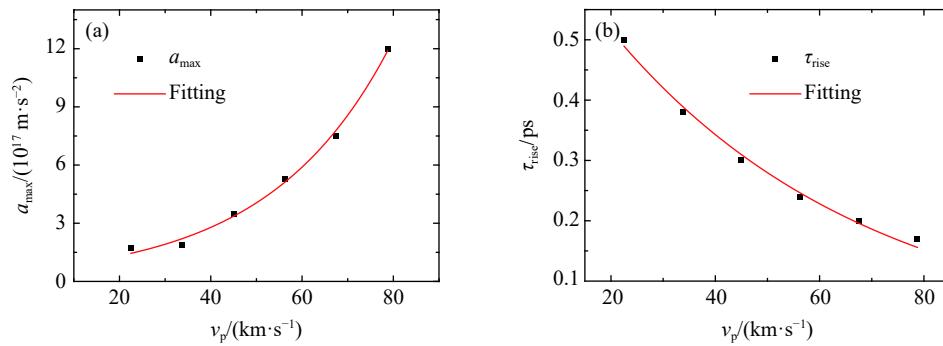


图6 Rayleigh模型的 a_{\max} 和 τ_{rise} 与 v_p 的拟合关系

Fig. 6 Fitted correlations of a_{\max} and τ_{rise} with v_p in Rayleigh model

这是在本计算模型条件下冲击加载速度在20~80 km/s范围内激波压缩电离诱导附加电场引起的界面金属侧物质附加加速度的经验模型, 揭示了极端加载条件下物质电离引起的附加电场对界面物质运动影响的基本特征。从积分效应来看, 虽然其脉冲时间在皮秒量级, 但所导致的界面物质的附加速度增量可达百千米每秒量级, 显然不可忽视。当然, 这只是界面物质加速的一方面, 其他作用力耦合后, 最终效应取决于综合效果。

3 结 论

采用基于电子力场势函数的分子动力学方法, 模拟了极端加载条件下金属/气体(Li/H₂)平滑界面运动过程, 对激波压缩电离过程及电荷扩散在激波附近诱导的电荷分离效应进行了理论分析和结果统计, 发现了电荷分离诱导附加电场及其对界面物质加速作用的现象, 进一步开展了理论建模和经验拟合分析, 获得了电离引起界面附近金属侧物质附加加速度的经验模型, 主要获得如下结论:

(1) 极端冲击加载下, 激波诱导附加电场的基本机理是, 极端冲击使材料电离出较轻的电子和较重的离子, 电子和离子的扩散差异导致在激波附近形成电荷分离区并达到动态扩散平衡, 诱导出附加电场;

(2) 统计分析发现, 电荷分离区的宽度和强度在激波运动过程中基本保持稳定, 它们仅与初始冲击加载速度相关, 即与激波强度相关, 呈非线性关系;

(3) 由附加电场引起的界面物质的附加加速效应可能显著影响界面演化, 统计分析发现, 界面处金属侧的加速度满足Rayleigh模型, 呈脉冲形态, 揭示了极端加载条件下物质电离引起的附加电场对界面物质运动影响的基本特征, 从积分效应来看, 虽然其脉冲时间在皮秒量级, 但其影响却不可忽视。

需要指出的是,本研究结果基于微观分子动力学模拟,其尺度在百纳米量级,相关结论尽管揭示了内在机理,但在一定程度上还受尺度效应的限制。后续工作将进一步加大模拟尺度并开展理论建模,进而推广到宏观尺度范围,使之更贴合工程实际工况。

参考文献:

- [1] VELIKOVICH A L, DIMONTE G. Nonlinear perturbation theory of the incompressible Richtmyer-Meshkov instability [J]. *Physical Review Letters*, 1996, 76(17): 3112.
- [2] NAKAI S, TAKABE H. Principles of inertial confinement fusion-physics of implosion and the concept of inertial fusion energy [J]. *Reports on Progress in Physics*, 1996, 59(9): 1071.
- [3] ANDREWS M J. Workshop: research needs for material mixing at extremes: LA-UR-11-02565 [R]. Los Alamos: Los Alamos National Laboratory, 2011.
- [4] GRAZIANI F R, BATISTA V S, BENEDICT L X, et al. Large-scale molecular dynamics simulations of dense plasmas: the Cimarron Project [J]. *High Energy Density Physics*, 2012, 8(1): 105–131.
- [5] ZHAKHOVSKII V, NISHIHARA K, ABE M. Molecular dynamics simulation on stability of converging shocks [C]//TANAKA K A, MEYERHOFER D D, MEYER-TER-VEHN J. Proceedings of the 2nd International Conference on Inertial Fusion Science and Applications. Elsevier, 2002: 106-109.
- [6] KADAU K, GERMANN T C, HADJICONSTANTINOU N G, et al. Nanohydrodynamics simulations: an atomistic view of the Rayleigh-Taylor instability [J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2004, 101(16): 5851–5855.
- [7] ZYBIN S V, ZHAKHOVSKII V V, BRINGA E M, et al. Molecular dynamics simulations of the Richtmyer-Meshkov instability in shock loaded solids [J]. *AIP Conference Proceedings*, 2006, 845(1): 437–441.
- [8] CHERNE F J, DIMONTE G, GERMANN T C. Richtmyer-Meshkov instability examinedwith large-scalemolecular dynamics simulations [J]. *AIP Conference Proceedings*, 2012, 1426(1): 1307–1310.
- [9] KOHANOFF J, HANSEN J P. *Ab initio* molecular dynamics of metallic hydrogen at high densities [J]. *Physical Review Letters*, 1995, 74(5): 626.
- [10] KOHANOFF J, HANSEN J P. Statistical properties of the dense hydrogen plasma: an *ab initio* molecular dynamics investigation [J]. *Physical Review E*, 1996, 54(1): 768.
- [11] KRESSE G, HAFNER J. *Ab initio* molecular dynamics for liquid metals [J]. *Physical Review B*, 1993, 47(1): 558.
- [12] COLLINS L, KWON I, KRESS J, et al. Quantum molecular dynamics simulations of hot, dense hydrogen [J]. *Physical Review E*, 1995, 52(6): 6202.
- [13] 龚新高. 高温及高压下液体镓的结构——第一性原理分子动力学方法研究 [J]. 物理学报, 1995, 44(6): 885–896.
GONG X G. Structural properties of liquid gallium at high temperature and high pressure: an *ab initio* molecular dynamics study [J]. *Acta Physica Sinica*, 1995, 44(6): 885–896.
- [14] 何以广. 氢和氦高压物性的第一原理分子动力学研究及实验探索 [D]. 北京: 清华大学, 2010.
- [15] 张玉娟. 温稠密乙烷等流体物性的第一性原理分子动力学研究 [D]. 北京: 中国工程物理研究院, 2013.
- [16] 刘海, 李启楷, 何远航. 高速冲击压缩梯恩梯的分子动力学模拟 [J]. 力学学报, 2015, 47(1): 174–179.
LIU H, LI Q K, HE Y H. Molecular dynamics simulations of high velocity shock compressed TNT [J]. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2015, 47(1): 174–179.
- [17] 宋海峰, 刘海风. 金属铍热力学性质的理论研究 [J]. 物理学报, 2007, 56(5): 2833–2837.
SONG H F, LIU H F. Theoretical study of thermodynamic properties of metal Be [J]. *Acta Physica Sinica*, 2007, 56(5): 2833–2837.
- [18] 王聪, 贺贤土, 张平. 温稠密物质的量子及半经典分子动力学研究 [C]//中国力学大会 2013 论文摘要集. 西安, 2013.
- [19] 戴佳钰, 康冬冬, 侯永, 等. 高温稠密物质的多尺度动力学研究 [C]//中国力学大会 2013 论文摘要集. 西安, 2013.
- [20] SU J T, GODDARD III W A. Excited electron dynamics modeling of warm dense matter [J]. *Physical Review Letters*, 2007, 99(18): 185003.
- [21] SU J T, GODDARD III W A. The dynamics of highly excited electronic systems: applications of the electron force field [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2009, 131(24): 244501.

- [22] JARAMILLO-BOTERO A, SU J, QI A, et al. Large-scale, long-term nonadiabatic electron molecular dynamics for describing material properties and phenomena in extreme environments [J]. *Journal of Computational Chemistry*, 2011, 32(3): 497–512.
- [23] 王维荣. 极端条件下单模界面不稳定性分子动力学研究 [D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2017.
- [24] HUANG S, WANG W, LUO X. Molecular-dynamics simulation of Richtmyer-Meshkov instability on a Li-H₂ interface at extreme compressing conditions [J]. *Physics of Plasmas*, 2018, 25(6): 062705.
- [25] DIMONTE G, REMINGTON B. Richtmyer-Meshkov experiments on the Nova laser at high compression [J]. *Physical Review Letters*, 1993, 70(12): 1806.
- [26] DIMONTE G, FRERKING C E, SCHNEIDER M, et al. Richtmyer–Meshkov instability with strong radiatively driven shocks [J]. *Physics of Plasmas*, 1996, 3(2): 614–630.

Acceleration Evaluation Model of Metal/Gas Interface by Extra Electric Field Induced by Shock under Extreme Impacting Conditions

ZHANG Jiawei, HUANG Shenghong

(CAS Key Laboratory of Mechanical Behavior and Design of Materials, Department of Modern Mechanics,
University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

Abstract: The evolution processes of metal/gas (Li/H₂) interface at extreme impacting conditions (22.50–78.75 km/s) were numerically studied by molecular dynamics (MD) method incorporated with the electron force field (eFF) model. It was found that the strong shock compression leads to ionization and the electron/ion separation is produced due to different diffusivities of ions and electrons. Then a strong extra electric field was established adjacent to shock front. Through 1D statistic along shock propagating direction from MD results and theoretical analysis, it was found that the electron/ion separation is moving with shock and the intensity and width of electron/ion separation zone are kept to be constant during shock propagating process and determined by shock strength. Further integrating the extra electric field and extra acceleration of metal material adjacent to the interface, the time histories of material acceleration were obtained. It was found that the extra material acceleration curves were in accordance with Rayleigh model. The key parameters were fitted based on computation results. Finally, an empirical extra acceleration evaluation model of metal material on Li/H₂ interface under impact velocity range of 20–80 km/s was established.

Keywords: extreme condition; electron/ion separation; Richtmyer-Meshkov instability; acceleration; electric field; molecular dynamics

“反尖端”界面不稳定性数值计算分析

王 涛^{1,2}, 汪 兵², 林健宇², 柏劲松², 李 平², 钟 敏², 陶 钢¹

(1. 南京理工大学能源与动力工程学院, 江苏南京 210094;

2. 中国工程物理研究院流体物理研究所, 四川绵阳 621999)

摘要: 利用可压缩多介质黏性流动和湍流大涡模拟代码 (MVFT), 在超算平台上对“反尖端”界面不稳定性及其诱发的湍流混合问题进行了大规模三维数值模拟分析。数值模拟结果清晰地显示了冲击波加载界面后分解产生的冲击波、稀疏波、压缩波及其在 SF₆ 气体中的运动和相互作用, 以及波多次加载界面的复杂过程, 波和界面的每一次作用都会加速湍流混合区的发展和物质混合。“反尖端”界面受冲击波加载后发生反相而形成典型的大尺度壁面气泡和中心轴尖钉结构, 该大尺度结构基本确定了湍流混合区的平均几何特征和包络范围而不依赖计算网格。高分辨率的计算网格下, 捕捉到了更精细的小尺度湍涡结构和更强的湍流脉动, 显示了湍流混合区所具有的复杂结构和特征。

关键词: 大涡模拟; 界面不稳定性; 湍流混合; 湍涡

中图分类号: O354; O357

文献标识码: A

不同流体间的扰动界面在冲击波作用下会发生不稳定性增长, 称为 Richtmyer-Meshkov(RM) 不稳定性^[1-2]。当 RM 不稳定性发展进入非线性阶段后, 扰动界面会发展为“蘑菇”状的尖钉/气泡结构; 之后由于界面两侧切向速度不匹配而产生剪切效应, 导致界面上又发生 Kelvin-Helmholtz(KH) 不稳定性^[3], 并诱发更多小尺度涡。KH 不稳定性出现会破坏“蘑菇”状界面结构的对称性, 使之破碎, 并加速湍流混合。流体界面不稳定性与湍流混合涉及许多重要领域, 如武器物理、惯性约束聚变、超音速燃烧、天体物理等, 因此具有重大的研究意义。

较早之前, 对于 RM 界面不稳定性与湍流混合, 研究人员关注的重点是湍流混合区宽度的增长规律及影响因素^[4-16]。随着实验诊断技术、高精度数值算法及并行计算技术的发展, 研究重点逐渐深入到湍流混合的内在机制和统计规律^[17-23]以及以此为基础的湍流混合建模^[24]。然而, 由于湍流混合的多尺度特性, 实验中所能获取的流场信息依然十分有限, 无法给出足够多的湍流混合区瞬态数据和精细复杂的混合区流场结构; 而数值模拟基本上能够给出所需要的有关湍流混合区流场的所有信息, 特别是借助超大规模的高性能计算, 可以在不同尺度上研究湍流混合的物理机制及其演化的统计特性。Cabot 等^[25]就曾在 IBM 的 BlueGene/L 超级计算机上利用 6 万多个核实现了 Rayleigh-Taylor(RT) 不稳定性及湍流混合的近 300 亿网格(3 072³)的超大规模直接数值模拟, 研究了湍流混合区增长的标度率问题和雷诺数效应。

AWE 开展的“反尖端”RM 不稳定性激波管实验中初始的 SF₆/空气右界面呈“V”形, 整体上类似于反的士兵臂章, 称为“反尖端”界面。本研究采用自研的可压缩多介质黏性流动和湍流大涡模拟程序 MVFT^[6, 21], 对“反尖端”界面不稳定性及湍流混合进行大规模并行数值模拟, 在高分辨率的网格下细致地研究“反尖端”界面不稳定性的发展过程和规律, 包括波系作用、湍流混合区结构的演化、湍流混合区统计量的变化等。

* 收稿日期: 2018-06-05; 修回日期: 2018-06-28

基金项目: 科学挑战计划(TZ2016001); 国家自然科学基金(11532012, 11702272)

作者简介: 王 涛(1979—), 男, 硕士, 副研究员, 主要从事计算力学研究. E-mail: wtao_mg@163.com

通信作者: 柏劲松(1968—), 男, 博士, 研究员, 主要从事计算力学研究. E-mail: bjsong@foxmail.com

1 计算方法

可压缩多介质黏性流动和湍流大涡模拟程序 MVFT 所求解的流场控制方程是经过 Favre 滤波后的可压缩多介质黏性流动 Navier-Stokes 方程组

$$\begin{cases} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = 0 \\ \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j + \bar{p} \delta_{ij})}{\partial x_j} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \\ \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{E} + \bar{p} \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial (\sigma_{ij} - \tau_{ij}) \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial (q_j^l + Q_j^T)}{\partial x_j} \\ \frac{\partial \tilde{Y}^{(s)}}{\partial t} + \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{Y}^{(s)}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\tilde{D} \frac{\partial \tilde{Y}^{(s)}}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial Q_j^Y}{\partial x_j} \end{cases} \quad (1)$$

式中: 下标 i, j 分别代表 x, y, z 3 个方向, 遵循张量运算法则; $\bar{\rho}, \tilde{u}_k (k = i, j), \bar{p}, \tilde{E}$ 分别为可解尺度流体的密度、速度、压强和单位质量总能量; N 为流体种类; $\tilde{Y}^{(s)}$ 表示第 s 种流体的体积分数 ($s=1, 2, \dots, N-1$), 且满足 $\sum_{s=1}^N \tilde{Y}^{(s)} = 1$; \tilde{D} 为扩散系数, $\tilde{D} = \nu/Sc$, ν 为流体运动黏性, Sc 为 Schmidt 数; $q_j^l = -\lambda_l \partial \tilde{T} / \partial x_j$ 是单位时间单位空间的可解尺度能量流, $\lambda_l = \mu_l c_p / Pr_l$ 是可解尺度热传导系数, c_p 为比定压热容, Pr_l 是 Prandtl 数, \tilde{T} 为流体温度; τ_{ij}, Q_j^T, Q_j^Y 为滤波后产生的亚格子输运项, 分别表示亚格子应力张量、热流量和体积分数输运通量, 需要通过亚格子尺度应力模型进行模化处理以使控制方程组封闭, 本研究采用 Vreman 亚格子模型^[26]。牛顿流体黏性应力张量 σ_{ij} 表示为

$$\sigma_{ij} = \mu_l \left[\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left(\frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \right] \quad (2)$$

式中: μ_l 为流体黏性。气体介质的状态方程采用理想气体状态方程。

具体计算过程为: 首先采用算子分裂技术将(1)式描述的物理过程分解为 3 个子过程进行计算, 即整个通量分解为无黏通量、黏性通量和热通量 3 部分。无黏通量的计算采用多介质高精度 PPM (Piecewise Parabolic Method) 方法, 两步 Lagrange-Remapping 型的 PPM 方法分 4 个步骤进行: (1) 物理量分段抛物插值, (2) 近似 Riemann 问题求解, (3) Lagrange 方程组推进求解, (4) 将物理量映射到静止的欧拉网格上。然后在无黏通量的基础上, 采用二阶空间中心差分方法和两步 Runge-Kutta 时间推进方法求解黏性通量、热通量及标量输运通量。

2 结果分析

本研究所采用的模型是英国 AWE 开展的“反尖端”RM 不稳定性激波管实验^[27], 计算模型如图 1 所示, 由细金属丝制成的网状支架支撑微米量级的硝化纤维薄膜将实验气体隔开, 形成预设的初始界面。激波管内截面尺寸为 $20 \text{ cm} \times 10 \text{ cm}$, “反尖端”区气体为 SF_6 , 其宽度为 15 cm , 两侧气体是空气, “反尖端”界面平衡位置距离激波管尾端 20 cm 。另外, 在初始界面上设置振幅小于 0.01 cm 、波长为 $0.5 \sim 5 \text{ cm}$ 的小尺度随机扰动, 以模拟支架的扰动效应。初始入射冲击波马赫数为 1.26。计算域: $(x, y, z) \in [0, 80 \text{ cm}] \times [-10 \text{ cm}, 10 \text{ cm}] \times [0, 10 \text{ cm}]$ 。实验得到的结果十分有限, 只是不同时刻混合区的演化图像及壁面气泡和尖钉位置(距激波管末端的距离), 不足以深入分析界面不稳定性及湍流混合发展规律。为此, 本研究借助大规模数值模拟, 利用 1024 个 CPU, 采用粗(网格大小 1.00 mm)、

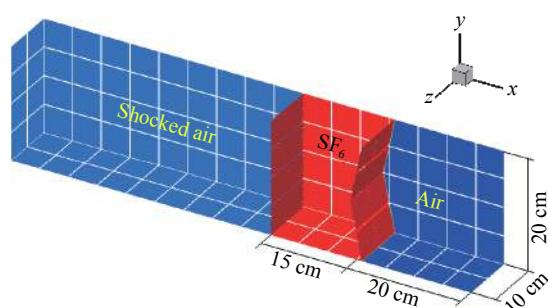


图 1 计算模型和“反尖端”界面

Fig. 1 Computational model and inverse chevron interface

中(网格大小 0.50 mm)、细(网格大小 0.25 mm)3 种不同分辨率的网格,详细研究“反尖端”界面不稳定性及湍流混合的演化特性。细网格下的网格总量为 1.024×10^9 。气体初始参数如表 1 所示,其中 γ 为气体比热比。

表 1 空气和 SF₆ 的初始参数Table 1 Initial properties of air and SF₆

Gas	$\rho /(\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$	$p /(\text{MPa})$	γ	$\mu /(\text{Pa} \cdot \text{s})$	Diffusion coefficient /($\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$)
SF ₆	5.97	0.1	1.09	1.4746×10^{-5}	0.97×10^{-5}
Air	1.18	0.1	1.40	1.8526×10^{-5}	2.04×10^{-5}

冲击波从低阻抗介质(如空气)向高阻抗介质(如 SF₆)方向加载物质界面时,会产生一个透射冲击波和一个反射冲击波;冲击波从高阻抗介质向低阻抗介质方向加载物质界面,会产生一个透射冲击波和一个反射稀疏波。图 2 给出了以密度显示的“反尖端”计算模型轴线上的一维近似波谱,可以看出复杂的波与界面以及波与波之间的相互作用,冲击波加载使流场密度增大,稀疏波卸载使流场密度减小。首先,入射冲击波从左侧加载空气/SF₆左界面,产生一个左行反射冲击波和一个右行透射冲击波;该右行透射冲击波加载 SF₆/空气右界面,在 SF₆ 气体中产生一个左行反射稀疏波,向右边空气中透射一个右行冲击波;右边空气中的右行冲击波会从激波管尾端反射回来再次与 SF₆/空气右界面作用,向 SF₆ 中产生一个左行透射冲击波(会在左界面上发生分解,向 SF₆ 中反射一个右行稀疏波),并向右边空气中产生一个右行反射冲击波,该右行反射冲击波会反复从激波管尾端反射回来加载 SF₆/空气右界面,在界面上发生分解;前面第一次在 SF₆/空气右界面上分解向 SF₆ 中产生的左行反射稀疏波和空气/SF₆ 左界面作用后向 SF₆ 中产生一个反射压缩波,该压缩波和 SF₆/空气右界面作用分解产生一个左行反射稀疏波,之后在 SF₆ 左右界面之间反复分解成压缩波和稀疏波。如图 2 所示,在 SF₆ 气体区域的胞格结构显示了冲击波、压缩波、稀疏波、界面之间的复杂相互作用,使得界面不稳定性发展更复杂,而波和界面的每一次作用都会促使混合区快速发展^[22]。

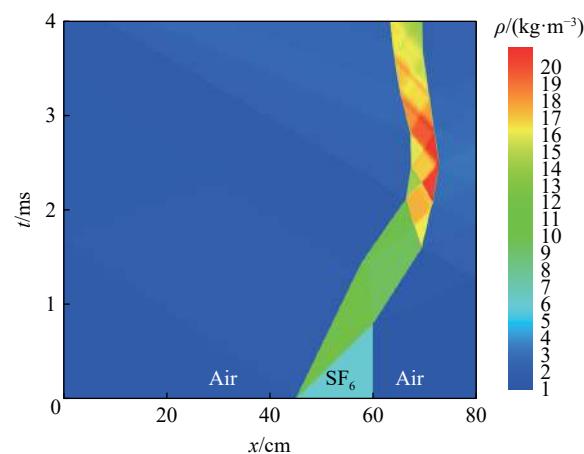


图 2 用流场密度显示的一维近似波谱图

Fig. 2 1D approximate wave visualized using flow field density

图 3 给出了“反尖端”界面及流场演化的实验图像和数值模拟结果比较,左列是实验结果,右 3 列从左至右依次是网格为 1.00、0.50、0.25 mm 时数值模拟的沿展向平均的密度场图像,清晰地显示了波和界面的相互作用及波系在流场中的相互作用和演化过程。实验和数值模拟二者之间,包括界面的形状和位置及波阵面的形状和位置均吻合很好。当冲击波与 SF₆ 区域左右界面作用后,界面上的小尺度随机扰动开始增长;而且在冲击波与 SF₆ 区域的右界面作用时,由于冲击波是从高阻抗介质向低阻抗介质方向加载界面,所以右界面的大尺度“反尖端”界面发生反相,从中心轴处生长出大尺度尖钉,靠近激波管上下壁处形成大尺度气泡结构,并且尖钉和气泡逐渐长大。对比 3 种不同网格分辨率数值模拟的展向平均密度场可以看出,界面大尺度结构和波系的演化差别很小,只是在中后期界面小尺度结构之间有较小的差别,这是由于展向平均抹去了一些细节结构造成的。图 4、图 5 和图 6 分别给出了 2.0、3.0、4.0 ms 时刻不同网格分辨率下以 SF₆ 体积分数 (Y_{SF_6}) 显示的湍流混合区三维图像。图中显示了复杂的三维湍流混合区演化,包括小尺度气泡/尖钉的长大、变形、融合等;不同分辨率网格计算所得的湍流混合区图像差别很大,其中高分辨率网格捕捉到了更精细的湍流混合区结构。图 7 给出了大尺

度壁面气泡和中心尖钉位置随时间变化的曲线,该位置是相对于激波管尾端的距离,不同颜色曲线表示不同网格分辨率下的数值计算结果。可以看出,在不同网格分辨率下计算所得的大尺度壁面气泡和中心尖钉的位置差别较小,这是因为大尺度壁面气泡和尖钉的位置由湍流混合区的包络线决定,而湍流混合区的包络线主要由大尺度结构决定,湍流混合区大尺度结构的平均特征在不同网格分辨率下的差别很小;虽然差别较小,但是细网格下的模拟结果与实验结果吻合得更好。

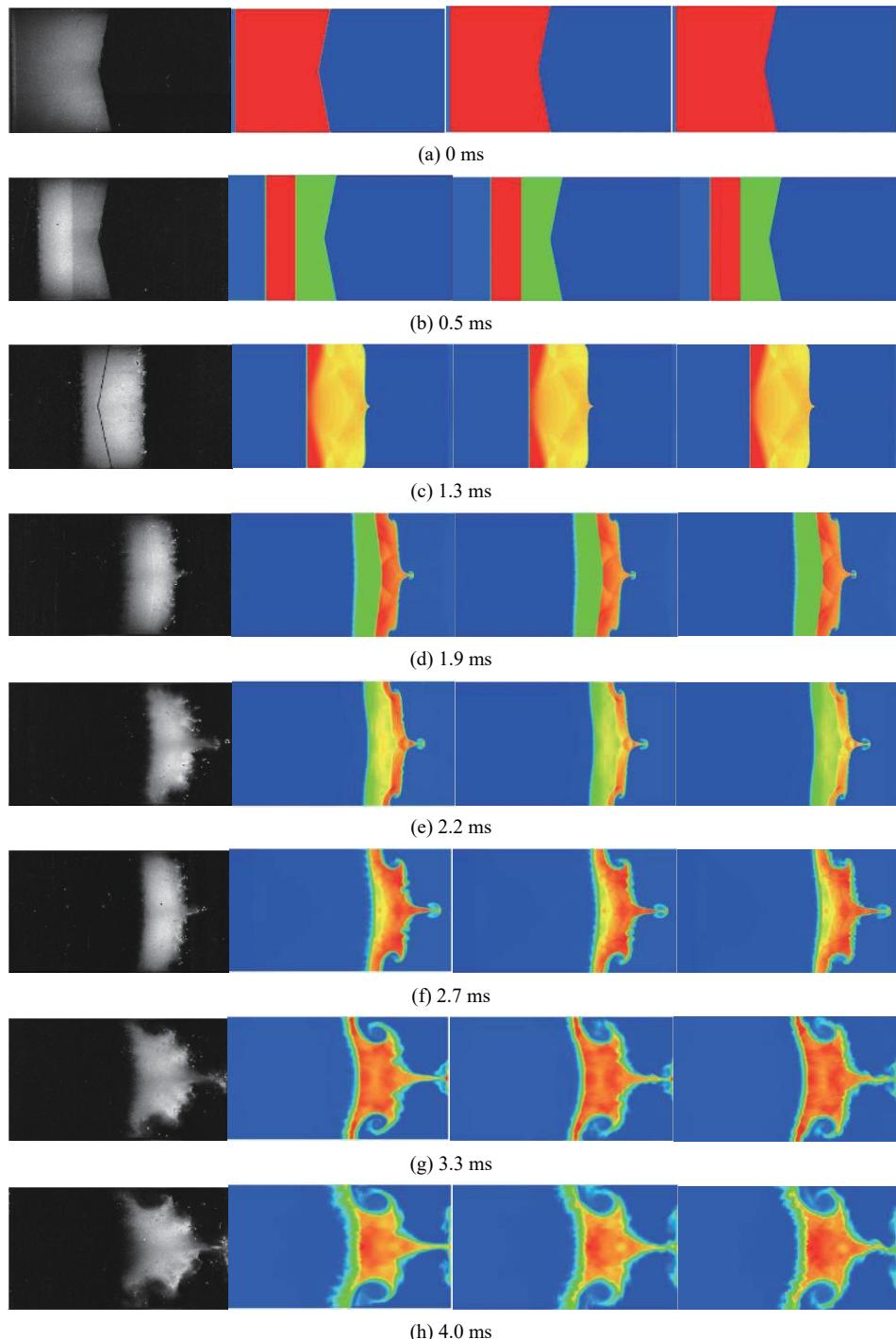


图3 “反尖端”界面演化的实验图像(左列)和以密度显示的数值模拟结果(三维计算的展向平均,右3列从左至右计算网格尺寸依次为1.00、0.50和0.25 mm)比较

Fig. 3 Comparison of experimental (left column) and simulated density images (three right columns on different grid resolutions) of inverse chevron interface

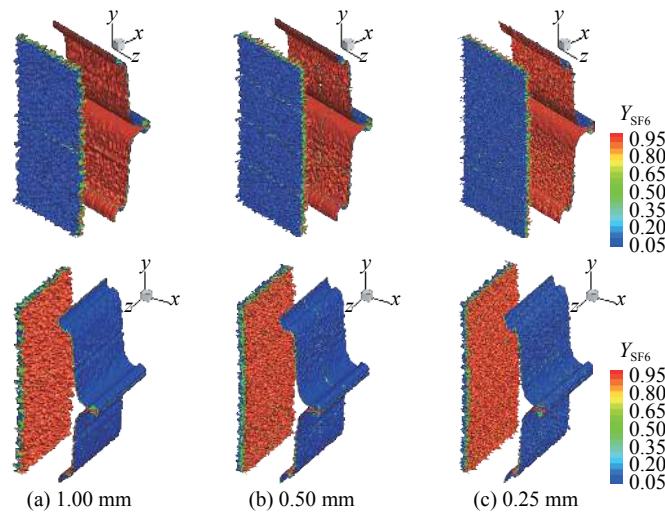


图4 2.0 ms时刻不同网格分辨率下以SF₆体积分数显示的湍流混合区三维图像

Fig. 4 3D images of turbulent mixing zone visualized using SF₆ volume fraction on different grid resolutions at 2.0 ms

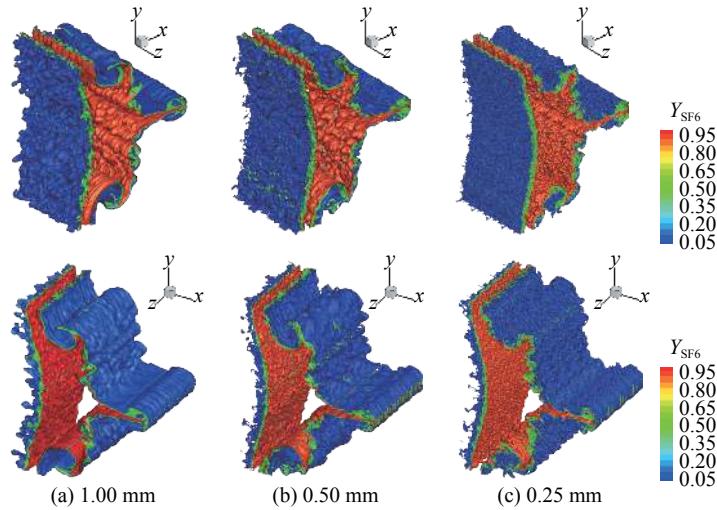


图5 3.0 ms时刻不同网格分辨率下以SF₆体积分数显示的湍流混合区三维图像

Fig. 5 3D images of turbulent mixing zone visualized using SF₆ volume fraction on different grid resolutions at 3.0 ms

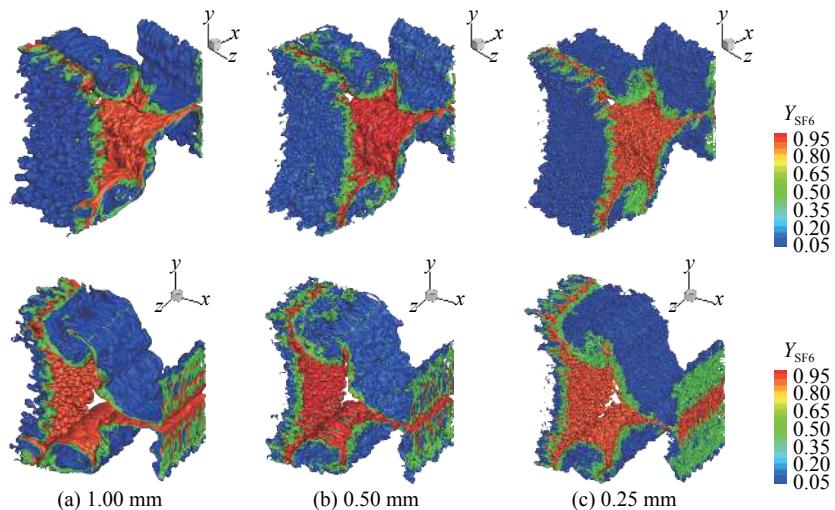


图6 4.0 ms时刻不同网格分辨率下以SF₆体积分数显示的湍流混合区三维图像

Fig. 6 3D images of turbulent mixing zone visualized using SF₆ volume fraction on different grid resolutions at 4.0 ms

图8和图9显示了1.0、2.0、3.0、4.0 ms时中心轴上流场密度和SF₆体积分数在不同网格分辨率下的分布。图中清晰地显示了冲击波的传播及其在界面上的分解,以及界面的发展演化,比如1.0 ms时刻的密度分布显示,冲击波加载使流场密度增大,SF₆气体中的右行透射冲击波与SF₆/空气界面作用后向SF₆气体中反射的左行稀疏波的卸载效应使流场密度减小。在前期(1.0~2.0 ms),不同网格分辨率计算的流场密度和SF₆体积分数的分布差别很小,说明混合区流场湍流发展不充分,小尺度脉动还未完全发展起来;后期(3.0~4.0 ms)不同网格分辨率的计算结果差别增大,表明在冲击波的多次复杂加载作用下混合区流场已经进入完全湍流阶段,更多小尺度脉动出现,细网格对这些小尺度含能涡结构有更高的分辨率,而粗网格将大量的小尺度含能涡结构耗散掉。

湍动能和拟涡能可以用来表征流场湍流脉动和湍涡的强度和发展。图10和图11分别为1.0、2.0、3.0、4.0 ms时刻无量纲化的流场湍动能K和拟涡能Ω在不同网格分辨率下沿冲击波运动方向的分布,无量纲化速度参数取初始入射冲击波后的流场速度133.6 m/s,无量纲化长度参数取计算模型宽度0.1 m。可以看出:随着混合区的发展,小尺度脉动逐渐发展起来;随着网格分辨率的增大,对这些小尺度脉动的捕捉能力也逐渐提高,捕捉到了更强的湍流脉动和湍涡。所以更小尺寸的网格对流场有更高的分辨率,可以捕捉到更精细的混合区湍流结构,这对于研究RM不稳定性及湍流混合演化的动力学行为非常重要。

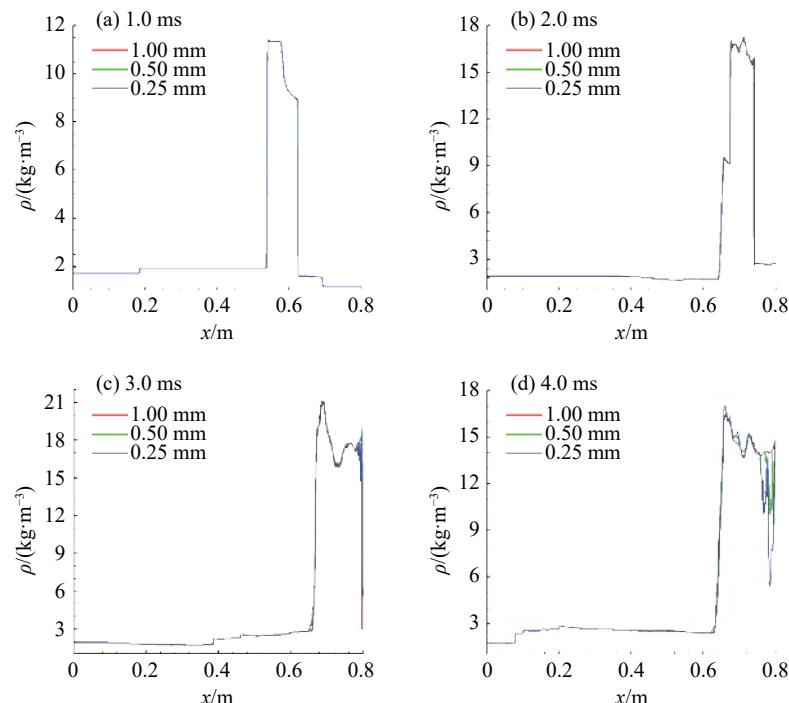


图8 不同时刻中心轴上的流场密度分布

Fig. 8 Flow density distributions along the centerline at different times

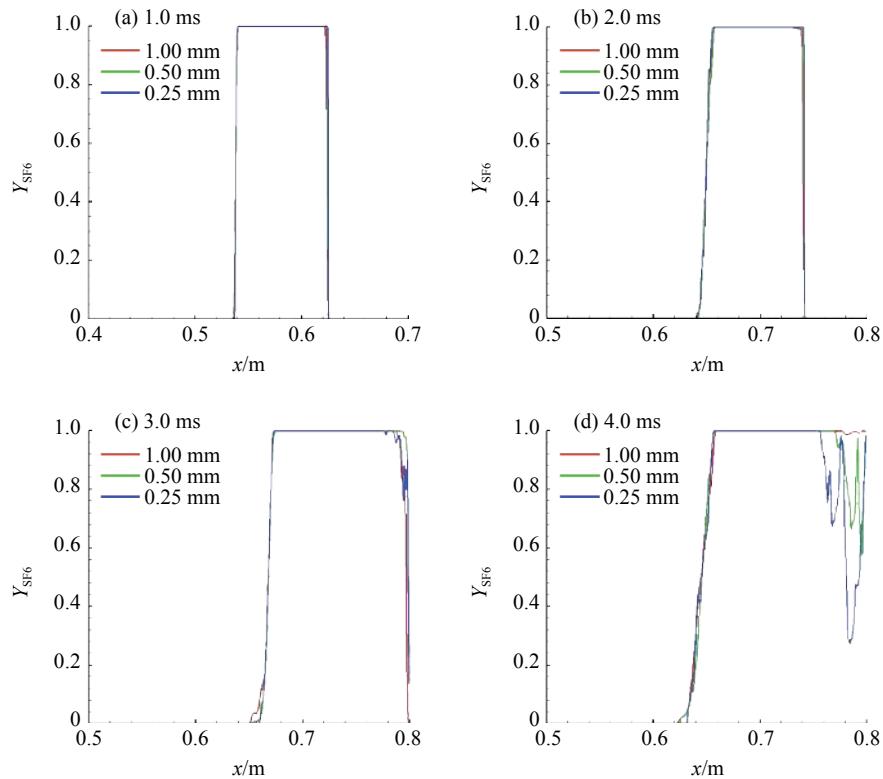
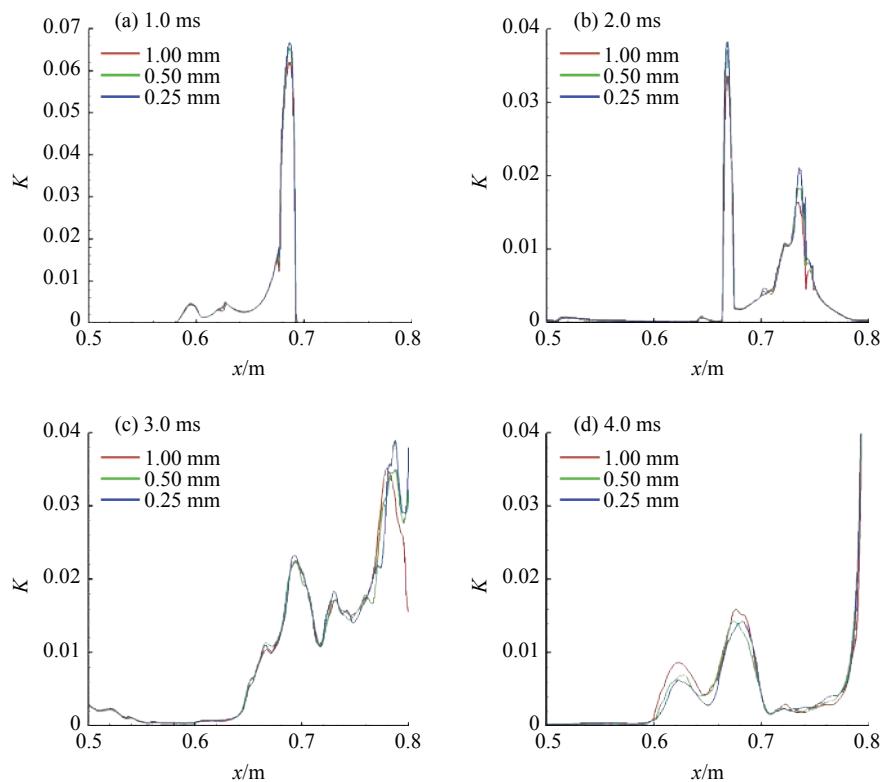
图9 不同时刻中心轴上 SF_6 体积分数分布Fig. 9 SF_6 volume fraction distributions along the centerline at different times

图10 不同时刻无量纲化湍动能沿冲击波运动方向的分布

Fig. 10 Dimensionless turbulent kinetic energy distributions along motion direction of shock wave at different times

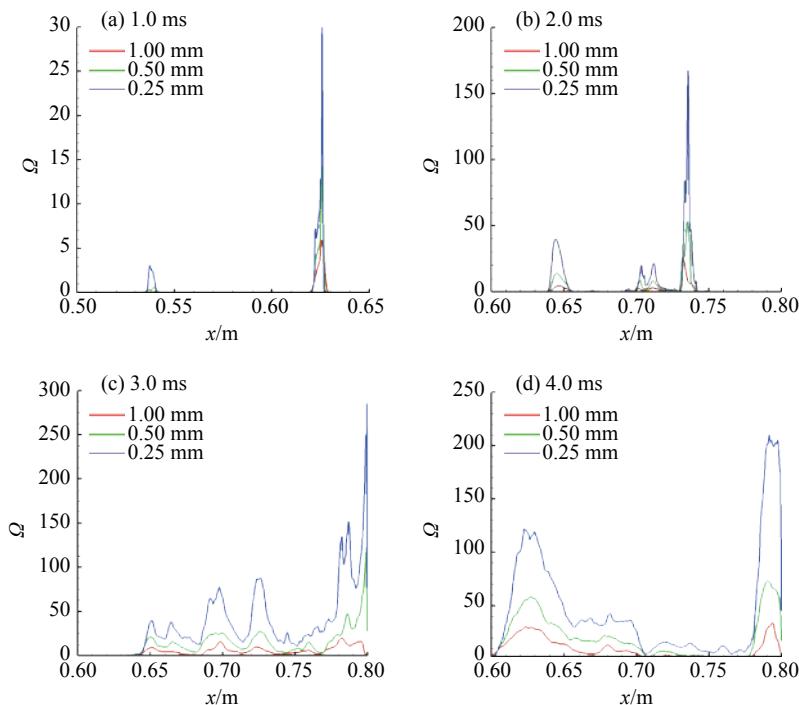


图 11 不同时刻无量纲化拟涡能沿冲击波运动方向的分布

Fig. 11 Dimensionless enstrophy distributions along motion direction of shock wave at different times

3 结 论

利用可压缩多介质黏性流动和湍流大涡模拟程序 MVFT, 对“反尖端”界面不稳定性及其诱发的湍流混合进行了大规模并行三维数值模拟分析, 揭示了界面不稳定性及湍流混合的复杂发展过程和规律。冲击波和空气/SF₆/空气界面作用并发生分解而产生冲击波、稀疏波、压缩波, 这些次生波在 SF₆ 气体中运动并相互作用, 而且多次加载物质界面以及波和界面的每一次作用都会加速湍流混合区的发展和物质混合。高/低阻抗构型的“反尖端”界面受冲击加载后发生反相而发展为大尺度的壁面气泡和中心轴尖钉结构, 该大尺度气泡和尖钉结构基本确定了湍流混合区的平均几何特征和包络范围而不依赖计算网格。采用高分辨率的计算网格能够捕捉到更精细的混合区小尺度湍涡结构及更强的湍流脉动, 显示出湍流混合区的复杂结构和特征。

参考文献:

- [1] RICHTMYER R D. Taylor instability in a shock acceleration of compressible of fluids [J]. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 1960, 13: 297–319.
- [2] MESHKOV E E. Instability of the interface of two gases accelerated by a shock wave [J]. *Fluid Dynamics*, 1969, 4(5): 101–104.
- [3] CHANDRASEKHAR S. *Hydrodynamic and hydromagnetic stability* [M]. London: Oxford University, 1961.
- [4] 王涛, 柏劲松, 李平, 等. 再冲击载荷作用下流动混合的数值模拟 [J]. *爆炸与冲击*, 2009, 29(3): 243–248.
- WANG T, BAI J S, LI P, et al. Numerical simulation of flow mixing impacted by reshock [J]. *Explosion and Shock Waves*, 2009, 29(3): 243–248.
- [5] WANG T, BAI J S, LI P, et al. The numerical study of shock-induced hydrodynamic instability and mixing [J]. *Chinese Physics B*, 2009, 18(3): 1127–1135.
- [6] BAI J S, LIU J H, WANG T, et al. Investigation of the Richtmyer-Meshkov instability with double perturbation interface in

- nonuniform flows [J]. *Physical Review E*, 2010, 81(2): 056302.
- [7] BAI J S, WANG B, WANG T, et al. Numerical simulation of the Richtmyer-Meshkov instability in initially nonuniform flows and mixing with reshock [J]. *Physical Review E*, 2012, 86(6): 066319.
- [8] XIAO J X, BAI J S, WANG T. Numerical study of initial perturbation effects on Richtmyer-Meshkov instability in nonuniform flows [J]. *Physical Review E*, 2016, 94(1): 013112.
- [9] LEINOV E, MALAMUD G, ELBAZ Y, et al. Experimental and numerical investigation of the Richtmyer-Meshkov instability under re-shock conditions [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2009, 626: 449–475.
- [10] THORNBERRY B, DRIKAKIS D, YOUNGS D L, et al. The influence of initial conditions on turbulent mixing due to Richtmyer-Meshkov instability [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2010, 654: 99–139.
- [11] LATINI M, SCHILLING O, DON W S. Richtmyer-Meshkov instability-induced mixing: initial conditions modeling, three-dimensional simulation and comparisons to experiment: UCRL-CONF-227160 [R]. Livermore: Lawrence Livermore National Laboratory, 2007.
- [12] SCHILLING O, LATINI M. High-order WENO simulations of three-dimensional reshocked Richtmyer-Meshkov instability to late times: dynamics, dependence on initial conditions, and comparisons to experimental data [J]. *Acta Mathematica Scientia*, 2010, 30(2): 595–620.
- [13] MALAMUD G, LEINOV E, SADOT O, et al. Reshocked Richtmyer-Meshkov instability: numerical study and modeling of random multi-mode experiments [J]. *Physics of Fluids*, 2014, 26(8): 084107.
- [14] MIKAELIAN K O. Testing an analytic model for Richtmyer-Meshkov turbulent mixing widths [J]. *Shock Waves*, 2015, 25(1): 35–45.
- [15] SI T, LONG T, ZHAI Z, et al. Experimental investigation of cylindrical converging shock waves interacting with a polygonal heavy gas cylinder [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2015, 784: 225–251.
- [16] LIANG Y, DING J, ZHAI Z, et al. Interaction of cylindrically converging diffracted shock with uniform interface [J]. *Physics of Fluids*, 2017, 29(8): 086101.
- [17] HILL D J, PANTANO C, PULLIN D I. Large-eddy simulation and multiscale modelling of a Richtmyer-Meshkov instability with reshock [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2006, 557: 29–61.
- [18] GRINSTEIN F F, GOWARDHAN A A, WACHTOR A J. Simulations of Richtmyer-Meshkov instabilities in planar shock-tube experiments [J]. *Physics of Fluids*, 2011, 23(3): 034106.
- [19] WEBER C, HAEHN N, OAKLEY J, et al. Turbulent mixing measurements in the Richtmyer-Meshkov instability [J]. *Physics of Fluids*, 2012, 24(7): 074105.
- [20] TRITSCHLER V K, OLSON B J, LELE S K, et al. On the Richtmyer-Meshkov instability evolving from a deterministic multimode planar interface [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2014, 755: 429–462.
- [21] WANG T, BAI J S, LI P, et al. Large-eddy simulations of the multi-mode Richtmyer-Meshkov instability and turbulent mixing under reshock [J]. *High Energy Density Physics*, 2016, 19: 65–75.
- [22] WANG T, TAO G, BAI J, et al. Dynamical behavior of the Richtmyer-Meshkov instability-induced turbulent mixing under multiple shock interactions [J]. *Canadian Journal of Physics*, 2017, 95(8): 671–681.
- [23] MOHAGHAR M, CARTER J, MUSCI B, et al. Evaluation of turbulent mixing transition in a shock-driven variable-density flow [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2017, 831: 779–825.
- [24] BANERJEE A, GORE R A, ANDREWS M J. Development and validation of a turbulent-mix model for variable-density and compressible flows [J]. *Physical Review E*, 2010, 82(4): 046309.
- [25] CABOT W H, COOK A W. Reynolds number effects on Rayleigh-Taylor instability with possible implications for type-Ia supernovae [J]. *Nature Physics*, 2006, 2(8): 562–568.
- [26] VREMAN A W. An eddy-viscosity subgrid-scale model for turbulent shear flow: algebraic theory and applications [J]. *Physics of Fluids*, 2004, 16(10): 3670–3681.
- [27] HOLDER D A, BARTON C J. Shock tube Richtmyer-Meshkov experiments: inverse chevron and half height [C]// Proceedings of the 9th International Workshop on Physics of Compressible Turbulent Mixing. Cambridge, UK, 2004.

Computational Analysis of RM Instability with Inverse Chevron Interface

WANG Tao^{1,2}, WANG Bing², LIN Jianyu², BAI Jingsong², LI Ping², ZHONG Min², TAO Gang¹

(1. School of Energy and Power Engineering, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, China;

2. Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621999, China)

Abstract: By using our in-house large-eddy simulation code, the MVFT (multi-viscous-flow and turbulence), we simulated the Richtmyer-Meshkov (RM) instability and turbulent mixed with the inverse chevron interface on a 3D large scale on the HPC (high performance computing) platform. The results revealed the propagations of the decomposed shock wave, the rarefaction wave, the compression wave and the interactions between the waves and the perturbed interface. Each impact of on the wave on the interface accelerates the evolution of the turbulent mixing zone and the materials' mixing. The inverse chevron interface inverts its phase after the first transmitted shock wave in the SF₆ zone hits it, then two wall bubbles and a centerline spike with large scale develop gradually. The averaged geometry feature and the envelop of turbulent mixing zone are determined by the large-scale wall bubbles and the centerline spike and are independent of the mesh. But with the higher grid resolution, more subtle small scale turbulent eddies and intense turbulent fluctuations are captured, characterizing the turbulent mixing zone as possessing a complex structure.

Keywords: large-eddy simulation; interface instability; turbulent mixing; turbulent eddy

微观尺度下金属/气体界面 RM 不稳定性 自相似现象的分子动力学模拟

丁 雨, 黄生洪

(中国科学技术大学近代力学系材料力学行为和设计重点实验室, 安徽 合肥 230026)

摘要: 极端冲击加载条件下的 RM (Richtmyer-Meshkov) 不稳定性在惯性约束核聚变领域有重要的学术价值和工程意义。宏观动力学方法受限于极端条件下的模型和参数准确性而难以直接应用, 微观分子动力学方法则受限于计算量而难以直接模拟宏观尺度现象。为了解 RM 不稳定性微观与宏观规律之间的联系, 采用基于嵌入原子多体势 (EAM) 的分子动力学方法模拟铜-氦微观尺度界面在极端冲击加载条件下 (活塞冲击加载速度 $6\sim 15 \text{ km/s}$) 的 RM 不稳定性现象, 对比文献提供的近似条件下宏观模拟结果发现, 演化过程在唯象上完全相似。进一步比较了不同尺度 ($7.3\sim 145.0 \text{ nm}$)、不同冲击加载速度 ($11.7\sim 20.6 \text{ km/s}$)、不同初始界面扰动 (扰动振幅与波长之比 $0.20\sim 0.05$) 条件下振幅发展规律, 发现在相同冲击动力条件和边界条件下, RM 不稳定的振幅增长规律在计算尺度范围内完全自相似, 主要参数的变化特征符合理论预测。尽管理论模型因简化而存在一定偏差, 但是微观模拟获得的振幅增长规律与宏观现象有相似的变化特征。

关键词: RM 不稳定性; 极端条件; 唯象相似; 自相似; 分子动力学

中图分类号: O354; O357

文献标识码: A

激波经过两种不同物质界面时, 界面的初始扰动会在激波加载作用下增长演化, 导致界面失稳最终进入湍流混合, 这种现象被称为 RMI (Richtmyer-Meshkov Instability)。RMI 是一种多尺度非线性现象, 广泛存在于自然现象和工业装置中, 一直是人们关注的基础问题之一^[1-2]。近年来, 随着惯性约束核聚变研究的发展, 极端冲击加载条件下的 RMI 问题逐渐受到重视, 但对相关问题的深入理解和认识仍面临巨大的挑战^[3]。

由于极端条件——高能量密度状态的特殊性, 目前在低能量密度范围建立的模型及数值预测方法, 如基于一般热力学条件的流体动力学 Navier-Stokes 方程、本构模型及湍流数值模拟方法等, 难以直接应用到高能量密度范围(如平均自由程、分解、电离及其他现象会导致一般条件下的 Navier-Stokes 方程失效, 状态方程、物性及运输系数发生剧烈变化等)。同时, 由于实验条件的极端性及诊断技术的局限性, 通过实验观测获得的认识还非常有限(如材料会出现电离现象并伴随强发光, 导致基于可见光的诊断技术受到一定限制等)。综合当前的研究发展趋势和技术现状, 从微观原子尺度出发, 采用分子动力学的建模和模拟方法正成为一种有效的技术手段。这类方法从描述原子或核子基本的相互作用势出发, 不要求预设任何宏观模型、本构关系或宏观运输系数等, 通过计算大量原子或核子的运动, 直接模拟各种能量密度范围内的物质运动, 可以涉及非平衡态、非连续效应、多组分/多相效应、电离以

* 收稿日期: 2018-07-31; 修回日期: 2018-09-06

基金项目: 国家自然科学基金(U1530125); 挑战专题(TZ2016001)

作者简介: 丁 雨(1995—), 男, 硕士研究生, 主要从事极端冲击问题的分子动力学模拟研究.

E-mail: dy123@mail.ustc.edu.cn

通信作者: 黄生洪(1974—), 男, 博士, 副教授, 主要从事极端冲击动力学研究. E-mail: hshnpu@ustc.edu.cn

及与材料混合相关的随机反应等各种复杂物理机制^[4-13]。不过,由于相互作用势建立在经验或理论近似(Predefined)基础上,仍需要针对极端条件进行修正或进一步发展。同时,由于多体相互作用的复杂性以及需要跟踪大量原子运动,受计算量的限制,目前只能应用于较小尺度(微米量级)。经过深入研究,我们通过对微观尺度的极端/非极端RMI现象的模拟^[14],基本了解了极端冲击条件下电离效应对RM界面失稳混合的影响机制,但是由于缺乏对微观状态RMI现象的直接观测,其结论的可靠性尚有待检验。微观分子动力学模拟基于原子尺度的基本相互作用原理,具有直接模拟性质,若能验证其在不同尺度范围的结果具有自相似性,并进一步取得与宏观尺度理论模型或规律的一致性,将有可能在RMI的微观与宏观现象之间通过自相似性规律建立关联,这无疑对验证结论的普适性以及进一步认识微介观尺度内的RM失稳混合机理具有重要意义。

本研究采用分子动力学(Molecular Dynamics, MD)方法模拟微观铜-氦(Cu-He)界面在冲击加载条件下的RMI现象,结合宏观理论模型,对不同微观尺度、不同初始激波速度、不同界面初始扰动等条件下的RMI振幅增长规律及流态的相似性进行研究。

1 模型和方法

图1显示了计算模型和基本参数定义。模型为一系列具有正弦界面的Cu-He单模结构:原始模型右侧为80个fcc(Face Centered Cubic)晶格长度的铜,左侧为200个晶格长度的氦气,纵向为40个晶格长度,厚度为4个晶格长度,初始尺寸($X \times Y \times Z$)约为 $137.00\text{ nm} \times 14.50\text{ nm} \times 1.45\text{ nm}$,界面处初始正弦扰动 h_0 与波长 λ 之比 $a=h_0/\lambda=0.2$,总原子数为14.7万。

模拟过程在开源分子动力学代码Lammps软件平台上进行。采用嵌入原子多体势(Embedded Atom Method, EAM)描述金属Cu原子间的相互作用。EAM势函数的主要思想是把晶体的总势能分为位于晶格点阵上原子核之间相互作用的对势和原子核嵌入到周围电子云背景中的嵌入能,成功弥补了早期势函数(对势)未考虑多体相互作用的不足。实际构成EAM势函数时,靠经验选取对势函数和嵌入能势函数中的参数,参数的决定标准与同种原子的宏观参数及微观晶格结构相匹配。因此EAM势是与宏观匹配的经验模型,在分子模拟中有着非常广泛的应用^[15-17]。需要说明的是,本研究所计算的Cu的EAM势函数已在RMI的相关研究^[17]中大量应用,其正确性和可靠性可以保证。He原子间及He原子与Cu原子间的势函数采用L-J(Lennard-Jones)势函数,该势函数是经过大量验证的模拟惰性气体凝聚态性能的常用势函数。

计算时间步长初设为 $5 \times 10^{-18}\text{ s}$,首先在NVT系综下弛豫1 ps,接着设定Cu端右侧刚性壁以恒定速度向左侧冲击压缩(模拟活塞),压缩速度 V_p 为6~15 km/s。冲击开始后,Cu内将产生向左运动的强激波,待激波到达气/固界面时,将产生RMI现象。

冲击压缩过程中,定义入射激波速度为 W_i ,界面透射后激波速度为 W_t 。如图1所示,初始模型中定义正弦界面Y方向上中心处凸起结构为尖钉(Spike),Y方向两端处凹陷结构为气泡(Bubble)。定义

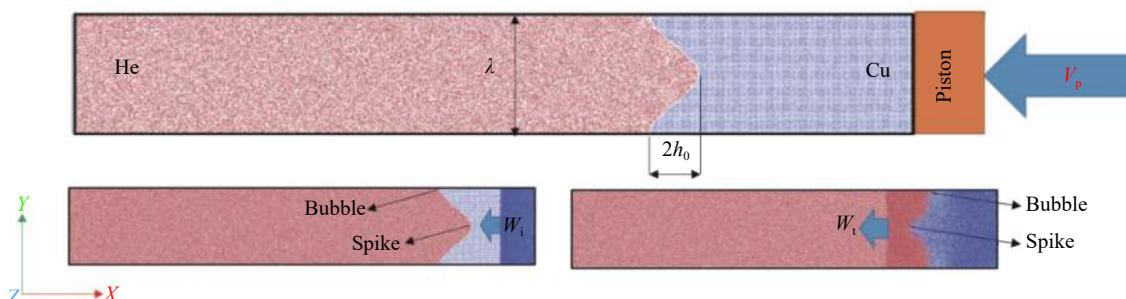


图1 初始Cu-He正弦单模界面模型及参数定义

Fig. 1 Initial characteristic parameters of single mode sinusoidal Cu-He interface model

界面初始 Atwood 数 $A^- = (\rho_{\text{He}} - \rho_{\text{Cu}})/(\rho_{\text{He}} + \rho_{\text{Cu}})$, 其中 ρ_{He} 和 ρ_{Cu} 分别为 He 和 Cu 的初始密度。本研究中, $\rho_{\text{He}}=0.281 \text{ g/cm}^3$, $\rho_{\text{Cu}}=8.93 \text{ g/cm}^3$, 即 $A^-=-0.94$ 。定义激波压缩后的 Atwood 数为 A , 由波后密度计算。

为比较不同尺度的影响, 原始模型在 $X \times Y$ 方向扩大相应倍数, Z 向尺度不变(主要观察单模平面内的 RMI 问题, 为此 Z 向尺度基本不变, 可以节省原子数量), 其中最大的 10 倍模型尺寸($X \times Y \times Z$)为 $1370.00 \text{ nm} \times 145.00 \text{ nm} \times 1.45 \text{ nm}$, 其冲击波传播方向尺度已达到微米量级, 原子总数 1470 万。

最后, 进一步计算了微观尺度下冲击加载速度 V_p 、初始正弦扰动与波长比 a 等参数对 RMI 过程的影响。

2 结果与分析

2.1 RMI 宏观与微观演化过程的唯象相似性

图 2 首先比较了宏观 RMI 与微观 RMI 演化过程的唯象相似性, 左侧为 Rikanati 等^[18]采用宏观流体力学程序 LEEOR-2D 模拟强激波(马赫数 $Ma=15.3$)冲击百微米尺度单模界面($\lambda=100 \mu\text{m}$, $a=0.1$)的 RMI 密度云图, 右侧为本研究采用分子动力学模拟的 $V_p=6 \text{ km/s}$, $\lambda=14.5 \text{ nm}$, $a=0.2$ 条件下的 RMI 密度云图。尽管冲击条件和边界条件不完全相同, 但是从密度云图上可以直观地看到激波冲击界面后两种尺度界面的演化过程在唯象上相似: 如图 2(a)所示, 两种工况中激波刚过界面时, 激波从重流体向轻流体透射, 反射稀疏波, 由于冲击波较强, 初始扰动的相位发生反转, 尖钉和气泡位置交错; 激波透射一段时间以后, 见图 2(b), 与界面作用发生弯曲的激波再次恢复平直, 稀疏波向激波相反方向继续传播; 从图 2(c)可以看出, 尖钉边缘出现卷起, 出现蘑菇头一样的形状, 由于尺度较小, 右侧微观尺度模拟结果中边界略显模糊; 而在图 2(d)中可以看出, 尖钉边缘卷起部分出现不稳定增长, 开始进入湍流混合阶段。通过比较可知, 虽然右侧是纳米尺度下的模拟结果, 其显示的 RMI 过程与宏观百微米尺度模拟的 RMI 演化过程完全唯象相似。

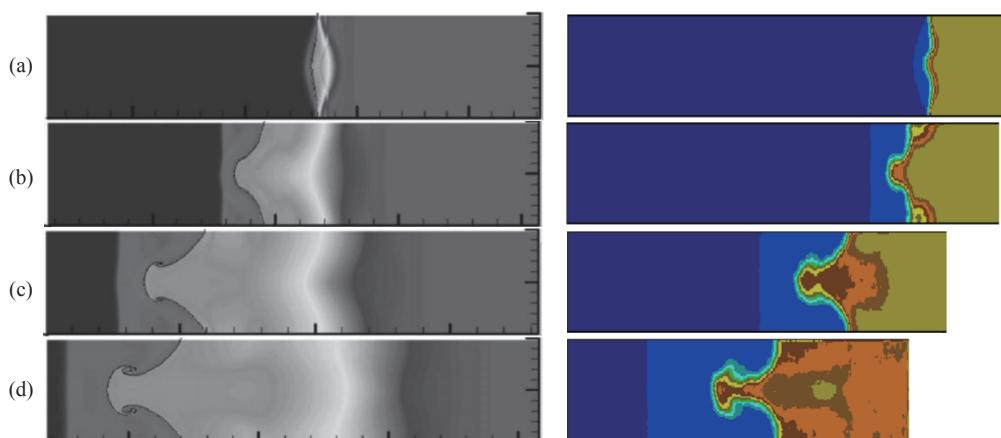


图 2 宏观流体动力学模拟的单模 RMI(左)与 MD 模拟的微观结果(右)的唯象相似性

Fig. 2 Macroscopic hydrodynamics and microscopic molecular dynamics simulations of single mode RMI (left) with similar phenomenological results (right)

2.2 不同尺度下 RMI 振幅增长规律的相似性

对于 $V_p=6 \text{ km/s}$, $a=0.2$ 的初始模型, 提取尖钉和气泡在不同时刻的位置(X_{sp} 和 X_{bu}), 绘制出图 3。图 4 则进一步显示了典型时刻的密度分布和原子排布。可以看出: 3.3 ps 时激波到达尖钉结构, 使尖钉产生接近线性的增长, 并向两侧气泡位置发出斜激波; 3.8 ps 时激波到达气泡位置, 使气泡处也产生加速; 5.2 ps 时, 斜激波也到达气泡处, 再次使气泡加速; 8.0 ps 时, 进入反射激波再作用(Reshock)阶段。

定义振幅 $I=(X_{\text{bu}}-X_{\text{sp}})/2$, 进一步得出振幅随时间的演化过程, 如图 5 所示。3.3 ps 时, 激波到达尖钉结构, 进入激波压缩阶段, 界面开始相位逆转; 3.8 ps 时, 压缩阶段结束, 进入线性增长阶段, 振幅以初始

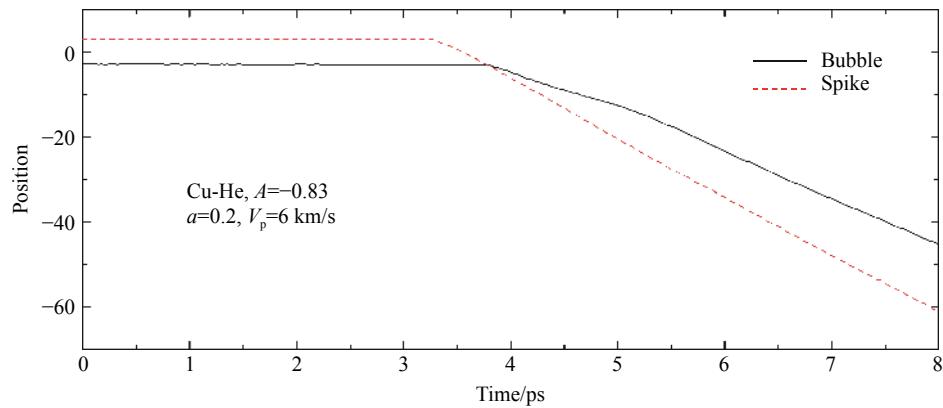


图3 气泡/尖钉位置-时间图像

Fig. 3 Displacement-time histories of bubble/spike position

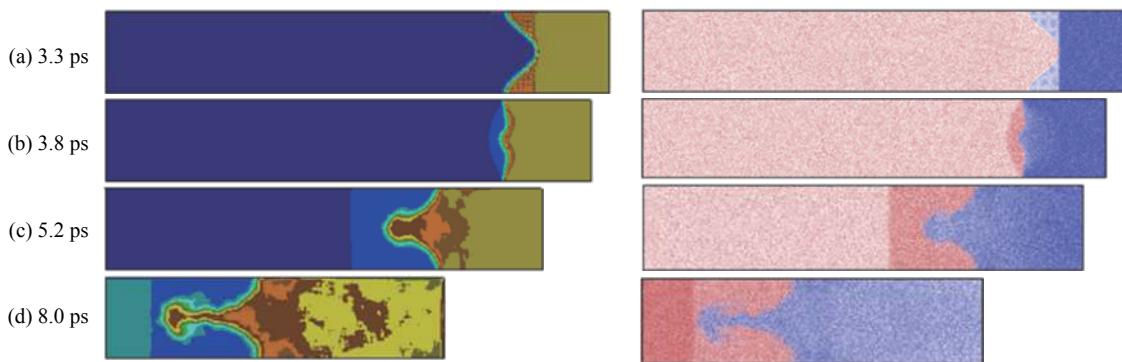


图4 微观 RMI 现象典型时刻的密度分布与原子分布

Fig. 4 Density contours and atom arrangements map of RMI simulations by MD at typical time constants

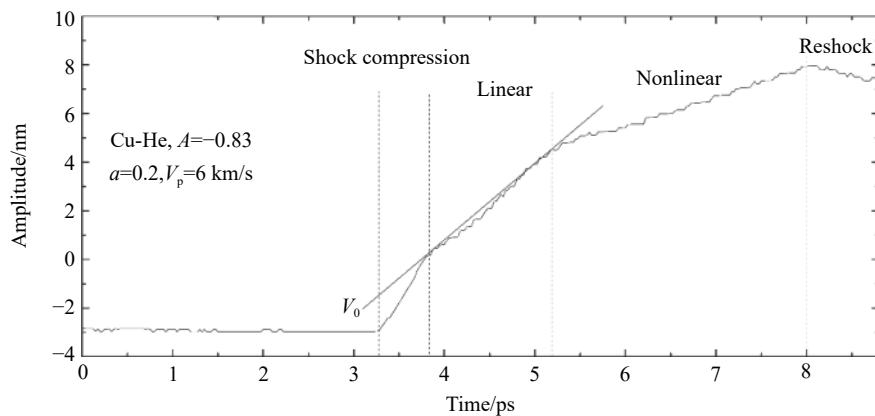


图5 RMI 振幅-时间演化图像

Fig. 5 Time histories of RMI amplitude evolution

速度 V_0 近似线性增长；5.2 ps 时，线性增长阶段结束，进入非线性增长阶段；8.0 ps 时，激波撞击模型左侧壁面再反射，进入反射激波再作用阶段。

进一步调整波长尺度开展模拟， λ 依次选择 7.3、14.5、29.0、72.5、145.0 nm， V_p 和 a 及模型比例保持不变，计算模型依次为最小模型的 0.5、1、2、5、10 倍尺度。由计算结果统计出 RMI 演化过程中的主要参数，见表 1，可以观察到：在 V_p 和 a 不变的条件下，改变模型尺度后，入射激波速度 W_i 、透射激波速度

W_t 、界面运动速度 U 、振幅增长线性段初始速度 V_0 以及波后 Atwood 数 A 都没有明显差异。需要说明的是,由于是原子尺度模拟,统计宏观量时受到统计所选取的网格尺度范围内原子数量和运动数据涨落的影响,会存在一定的差异。为判断结果数据是否具有明显差异,定义 $\delta=|\text{数值}-\text{平均值}|/\text{平均值}$,结果列于表 1 中。可见, δ 普遍低于 1%,个别达到 3%,说明在初始动力学和边界条件相同的情况下,RMI 的主要参数是唯一确定的,不同尺度计算结果对参数的影响在统计误差范围之内。

表 1 RMI 不同尺度计算结果的参数统计

Table 1 Computed statistical results of RMI parameters at different scales

λ/nm	$W_t/(\text{km}\cdot\text{s}^{-1})$	$\delta_{W_t}/\%$	$W_t/(\text{km}\cdot\text{s}^{-1})$	$\delta_{W_t}/\%$	$U/(\text{km}\cdot\text{s}^{-1})$	$\delta_U/\%$	$V_0/(\text{km}\cdot\text{s}^{-1})$	$\delta_{V_0}/\%$	A	$\delta_A/\%$
7.3	11.5	0.3	18.1	1.4	11.5	1.8	3.16	2.3	-0.83	1.1
14.5	11.7	2.1	17.6	1.3	11.9	1.5	3.19	1.4	-0.83	1.1
29.0	11.5	0.3	18.2	2.0	11.7	0.1	3.23	0.1	-0.84	0
72.5	11.4	0.5	17.7	0.7	12.1	3.2	3.28	1.3	-0.85	1.1
145.0	11.2	2.2	17.6	1.3	11.4	2.7	3.32	2.5	-0.85	1.1

将振幅增长无量纲化:以振幅线性段起点为零点,记为 h ,纵轴以 $kh=2\pi h/\lambda$ 为无量纲参数,横轴以 $\tau=kV_0 t$ 为无量纲参数,绘制出无量纲振幅增长曲线,如图 6 所示。

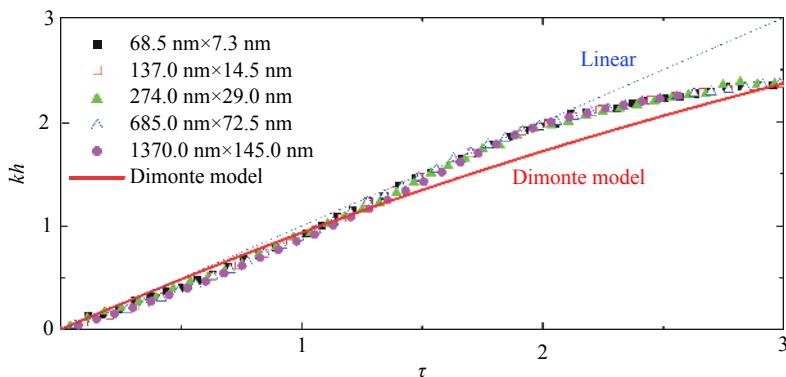


图 6 不同尺度模型的无量纲振幅-时间曲线

Fig. 6 Non-dimensional amplitude evolution histories of different scale simulations

根据宏观实验结果和理论,Dimonte 等^[19]给出了 RMI 宏观尺度下的振幅无量纲增长模型,即

$$V_{bu/sp}^{\text{Dimonte}} = V_0 \frac{1 + (1 \mp |A|)\tau}{1 + C_{bu/sp}\tau + (1 \mp |A|)F_{bu/sp}\tau^2} \quad (1)$$

式中: $C_{bu/sp} = \frac{4.5 \pm |A| + (2 \mp |A|)|kh_0^+|}{4}$, $F_{bu/sp} = 1 \pm |A|$, $kh_0^+ = 2\pi a^+$, h_0^+ 为波后振幅, a^+ 为波后振幅波长比。根据

(1)式,将表 1 获得的参数代入模型,可以获得按 Dimonte 理论模型预测的振幅增长规律,如图 6 红实线所示。为了进一步验证不同尺度 RMI 现象在不同无量纲时间段的相似性,选取不同尺度模型分别在无量纲时间 $\tau=-0.77, -0.20, 0.65, 1.59, 2.30$ 时刻的密度分布云图,如图 7 所示。

(1)从最小计算尺度工况($\lambda=7.3 \text{ nm}$)到最大计算尺度工况($\lambda=145.0 \text{ nm}$),振幅的无量纲增长规律在计算时间尺度范围内几乎完全重合,而相同无量纲时刻的界面密度演化形态也几乎无差异。可见,在相同冲击动力条件和边界条件下,RMI 现象的振幅增长规律在计算尺度范围内是完全自相似的。

(2)微观分子动力学模拟获得的振幅增长规律与 Dimonte 模型的预测结果在整体上是吻合的,主要差别在 $1.5 < \tau < 2.5$ 阶段,微观分子动力学模拟结果显示的振幅增长略高于 Dimonte 模型预测结果,且在 $\tau=1.7$ 附近显示出明显的非线性拐点。这种差异主要是因为 Dimonte 模型混合了线性和非线性段的

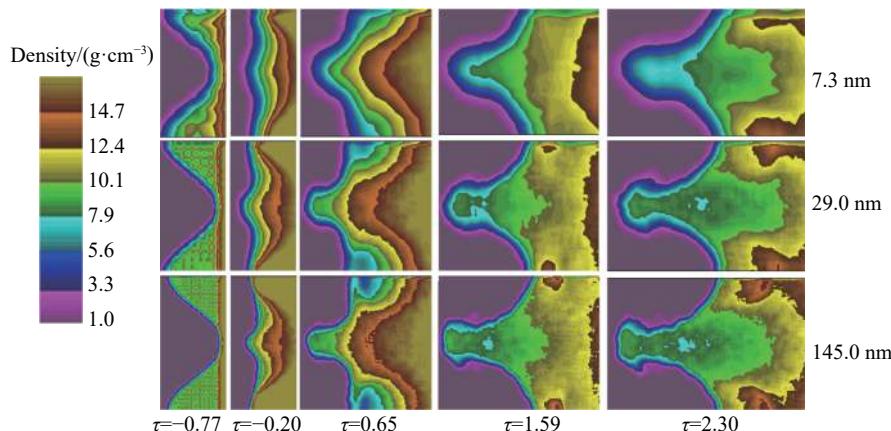


图7 不同尺度、相同无量纲时刻的密度等值图

Fig. 7 Density contours of different scale simulations with the same non-dimensional time constants

经验公式,导致预测曲线比较光滑,没有明确的线性段和非线性段区分。而本模拟结果是通过追踪尖钉和气泡位置计算而来,较为符合实际流动情况。

(3) 总体看来,尽管由于 Dimonte 模型存在一定的预测偏差,但是微观尺度下的 RMI 振幅演化规律和宏观尺度下的演化规律在所计算的无量纲时间段内存在一致性。

2.3 不同冲击加载速度对微观 RMI 振幅演化规律的影响

既然验证了在相同冲击动力条件下 RMI 振幅增长规律在不同尺度条件下是完全相似的,为进一步明确微观模拟与宏观现象之间的联系,进一步验证在微观条件下改变 RMI 的条件参数,其振幅演化规律是否与宏观具有相似的变化特征。为此,在保持模型波长($\lambda=14.5 \text{ nm}$)和振幅波长比 $a=0.2$ 不变的条件下,首先观察冲击加载速度 V_p 对 RMI 主要参数和振幅演化规律的影响。

共计算了冲击加载速度 V_p 分别为 6、9、12、15 km/s 4 种工况,重复 2.2 节中的分析步骤得到表 2,可见:随着 V_p 的增长, W_i 、 W_t 、 U 和 V_0 都相应地增长。显然,这符合 RMI 的宏观现象特征,有如下解释。

(1) 随着冲击速度的增加,冲击区驱动压力提高必然导致激波强度增强, W_i 增加;相应地,透射激波强度增强, W_t 增加;接触界面速度是由界面发生激波反射和透射后达到局部压力平衡后获得的速度,其大小必然随 W_i 和 W_t 的增加而增加。从比值来看, W_i 、 W_t 、 U 基本随 V_p 线性增加。

(2) 随着冲击速度的增加,入射激波强度和透射激波强度均有所增加,波后界面两侧密度均有所上升。在一定范围内,如果上升的比例接近,则波后 A 可能变化不大,这取决于物质的状态方程,从当前计算结果来看,在计算的冲击范围内波后 A 变化不大。

(3) 由于波后 A 变化不大,根据 RMI 线性理论, $V_0=V_{\text{in}}=AUa^+$ 。由于本工况下初始 a 相同,在强冲击压缩下,流体被压缩至接近不可压状态, $a^+=a$,且波后 A 变化不大,则 V_0 必然随着 U 的增大而近似线性增大。从表 2 的结果来看,随着冲击动力条件的增加, V_0 体现了上述变化。

表 2 不同冲击加载速度下 RMI 参数

Table 2 Parameters of RMI under different V_p

$V_p/(\text{km}\cdot\text{s}^{-1})$	$W_i/(\text{km}\cdot\text{s}^{-1})$	$W_t/(\text{km}\cdot\text{s}^{-1})$	$U/(\text{km}\cdot\text{s}^{-1})$	$V_0/(\text{km}\cdot\text{s}^{-1})$	A
6	11.7	17.6	11.9	3.22	-0.83
9	14.2	24.4	16.6	3.43	-0.84
12	16.5	33.5	21.9	3.57	-0.85
15	20.6	41.7	28.9	3.74	-0.83

图8进一步给出了不同 V_p 条件下,根据模拟结果获得的振幅增长规律与Dimonte模型根据RMI参数的预测结果对比。可见:二者在所计算的无量纲时间尺度内较好地吻合;由于波后 A 等参数相近,模拟结果和Dimonte模型预测结果均显示其无量纲振幅增长规律随 V_p 增长变化不大,说明微观尺度下冲击动力条件改变引起的振幅增长演化与宏观现象有相似的变化特征。

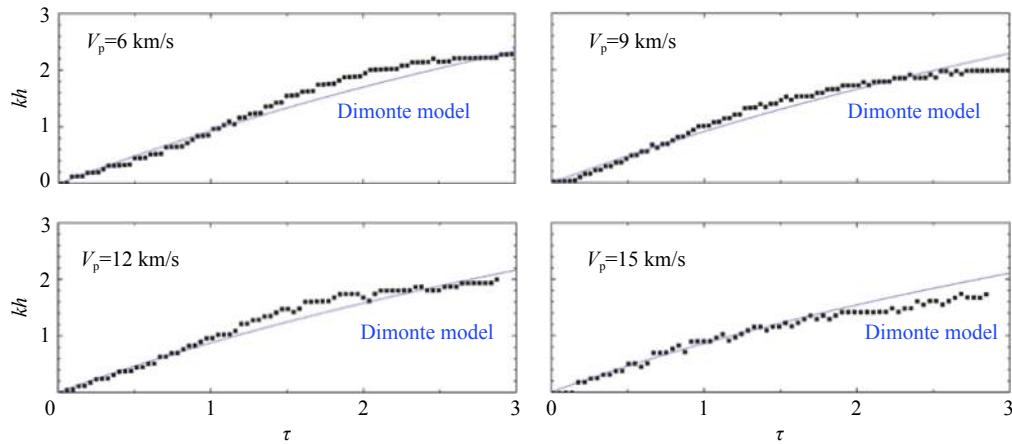


图8 不同冲击加载速度下的无量纲振幅-时间曲线

Fig. 8 Non-dimensional time histories of amplitude evolution under different V_p

2.4 不同初始振幅波长比对微观 RMI 振幅演化规律的影响

保持波长 $\lambda=14.5\text{ nm}$ 和冲击加载速度 $V_p=6\text{ km/s}$ 的条件不变,进一步计算了初始振幅波长比 a 分别为0.20、0.10、0.05工况,重复2.1节中的分析步骤得到表3。从表3可以看出:

(1) 初始振幅波长比 a 的减小并不会影响激波在界面前、后的传播速度,即 W_i 和 W_t 基本不变,波后Atwood数 A 因冲击动力条件未变而基本一致, U 由于前述参数不变也基本保持不变;

(2) 同样,根据RMI线性理论, $V_0=V_{lin}=AUa^+$,在强冲击压缩下,流体接近不可压状态, $a^+=a$,可见, V_0 随着 a 相应地线性变化。

表3 不同初始振幅波长比条件下 RMI 参数

Table 3 Parameters of RMI with different initial amplitude/wave length ratio

a	$W_i/(\text{km}\cdot\text{s}^{-1})$	$W_t/(\text{km}\cdot\text{s}^{-1})$	$U/(\text{km}\cdot\text{s}^{-1})$	$V_0/(\text{km}\cdot\text{s}^{-1})$	A
0.20	11.7	17.6	11.9	3.22	-0.83
0.10	11.7	17.8	11.8	2.00	-0.85
0.05	11.6	18.0	11.6	1.03	-0.84

图9(a)进一步给出了不同 V_p 条件下根据模拟结果获得的振幅增长规律与Dimonte模型根据RMI参数预测结果的对比。可见,二者在所计算的无量纲时间尺度内总体上较好地吻合。并且,由于波后 A 等参数相近,尽管 V_0 和 a 变化较大,Dimonte模型的预测结果显示其无量纲振幅增长规律随着 a 的减小变化不大。不过,分子动力学模拟结果显示,无量纲振幅增长规律随 a 的减小与Dimonte模型预测结果有一定偏差,这主要是因为Dimonte模型对 a 变化预测不敏感所致(如(1)式中与 a 有关的项只体现在分母中的 $C_{bu/sp}$ 中,其值的变化对整体变化的影响较小)。而从Holmes等^[20]给出的近似条件下($Ma=15.3$, $\lambda=100\text{ }\mu\text{m}$, $A=-0.584$, a 为 $0.04\sim0.25$, V_0 为 $3.29\sim11.6\text{ km/s}$)的宏观动力学模拟结果(见图9(b))来看,初始振幅波长比的减小在一定程度上引起线性段的降低。从图9所示的对比来看,本研究的微观模拟也反映了上述变化特征,充分反映了微观与宏观RMI现象和规律的自相似特征。

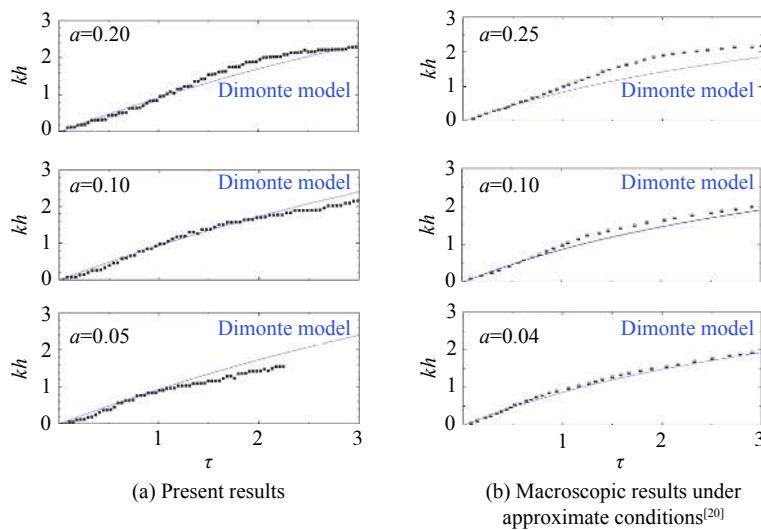


图9 不同初始振幅波长比条件下的无量纲振幅-时间曲线

Fig. 9 Non-dimensional time histories of amplitude evolution with different initial amplitude/wave length ratio

3 结 论

采用分子动力学方法模拟了微观 Cu-He 界面在冲击加载条件下的 RMI 现象,结合宏观理论模型,对不同微观尺度、不同初始激波速度、不同界面初始扰动等条件下的 RMI 振幅增长规律和流态的相似性进行研究,获得以下结论:

(1) 对比了采用宏观流体力学程序模拟强激波冲击百微米尺度单模界面的 RMI 现象与采用分子动力学模拟的 10 nm 尺度 RMI 现象,直观观察到激波冲击界面后两种尺度界面的演化过程唯象上相似;

(2) 在相同冲击动力条件和边界条件下, RMI 现象的振幅增长规律在计算尺度范围内完全自相似,且微观尺度下的 RMI 振幅演化规律和宏观尺度下 Dimonte 模型预测的演化规律存在一致性;

(3) 在微观模拟条件下,改变冲击加载条件和初始振幅波长比等 RMI 条件参数,影响 RMI 振幅演化的主要参数变化特征符合现有理论预测,尽管理论模型预测由于简化存在一定偏差,但是微观模拟获得的振幅增长规律与宏观现象有相似的变化特征。

总体来看,利用具有直接模拟性质的微观分子动力学手段,初步验证了 RMI 在不同尺度范围的结果具有自相似性,取得了与宏观尺度的理论模型或规律的一致性,可能通过自相似性规律在 RMI 的微观与宏观现象之间建立关联,为进一步认识微介观尺度内的 RM 失稳混合机理提供理论依据。

参考文献:

- [1] RICHTMYER R D. Taylor instability in shock acceleration of compressible fluids [J]. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 1960, 13(2): 297–319.
- [2] MESHKOV E E. Instability of the interface of two gases accelerated by a shock wave [J]. *Fluid Dynamics*, 1969, 4(5): 101–104.
- [3] ANDREWS M J. Workshop: research needs for material mixing at extremes: LA-UR-11-02565 [R]. Los Alamos: Los Alamos National Laboratory, 2011.
- [4] GRAZIANI F R, BATISTA V S, BENEDICT L X, et al. Large-scale molecular dynamics simulations of dense plasmas: the Cimarron Project [J]. *High Energy Density Physics*, 2012, 8(1): 105–131.
- [5] ZHAKHOVSKII V, NISHIHARA K, ABE M. Molecular dynamics simulation on stability of converging shocks [C]//

- TANAKA K A, MEYERHOFER D D, MEYER-TER-VEHN J. Proceedings of the 2nd International Conference on Inertial Fusion Science and Applications. Paris: Elsevier, 2002: 106-109.
- [6] KADAU K, GERMANN T C, HADJICONSTANTINOU N G, et al. Nanohydrodynamics simulations: an atomistic view of the Rayleigh-Taylor instability [J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2004, 101(16): 5851-5855.
- [7] ZYBIN S V, ZHAKHOVSKII V V, BRINGA E M, et al. Molecular dynamics simulations of the Richtmyer-Meshkov instability in shock loaded solids [J]. *AIP Conference Proceedings*, 2006, 845(1): 437-441.
- [8] CHERNE F J, DIMONTE G, GERMANN T C. Richtmyer-Meschov instability examined with large-scale molecular dynamic simulations: LA-UR-11-04503 [R]. Los Alamos: Los Alamos National Laboratory, 2011.
- [9] 龚新高. 高温及高压下液体镓的结构——第一性原理分子动力学方法研究 [J]. 物理学报, 1995, 44(6): 885-896.
- GONG X G. Structural properties of liquid gallium at high temperature and high pressure—an *ab initio* molecular dynamics study [J]. *Acta Physica Sinica*, 1995, 44(6): 885-896.
- [10] 何以广. 氢和氦高压物性的第一原理分子动力学研究及实验探索 [D]. 北京: 清华大学, 2010.
- [11] 张玉娟. 温稠密乙烷等流体物性的第一性原理分子动力学研究 [D]. 北京: 中国工程物理研究院, 2013.
- [12] 刘海, 李启楷, 何远航. 高速冲击压缩梯恩梯的分子动力学模拟 [J]. 力学学报, 2015, 47(1): 174-179.
- LIU H, LI Q K, HE Y H. Molecular dynamics simulations of high velocity shock compressed TNT [J]. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2015, 47(1): 174-179.
- [13] 王裴, 秦承森, 张树道, 等. SPH方法对金属表面微射流的数值模拟 [J]. *高压物理学报*, 2004, 18(2): 149-156.
- WANG P, QIN C S, ZHANG S D, et al. Simulated microjet from free surface of aluminum using smoothed particle hydrodynamics [J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 2004, 18(2): 149-156.
- [14] HUANG S, WANG W, LUO X. Molecular-dynamics simulation of Richtmyer-Meshkov instability on a Li-H₂ interface at extreme compressing conditions [J]. *Physics of Plasmas*, 2018, 25(6): 062705.
- [15] DAW M S, BASKES M I. Embedded-atom method: derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals [J]. *Physical Review B*, 1984, 29(12): 6443.
- [16] ACKLAND G J, BACON D J, CALDER A F, et al. Computer simulation of point defect properties in dilute Fe-Cu alloy using a many-body interatomic potential [J]. *Philosophical Magazine A*, 1997, 75(3): 713-732.
- [17] GERMANN T C, DIMONTE G, HAMMERBERG J E, et al. Large-scale molecular dynamics simulations of particulate ejection and Richtmyer-Meshkov instability development in shocked copper [C]// DYMAT 2009, EDP Sciences, 2009: 1499-1505.
- [18] RIKANATI A, ORON D, SADOT O, et al. High initial amplitude and high Mach number effects on the evolution of the single-mode Richtmyer-Meshkov instability [J]. *Physical Review E*, 2003, 67(2): 026307.
- [19] DIMONTE G, RAMAPRABHU P. Simulations and model of the nonlinear Richtmyer-Meshkov instability [J]. *Physics of Fluids*, 2010, 22(1): 014104.
- [20] HOLMES R L, DIMONTE G, FRYXELL B, et al. Richtmyer-Meshkov instability growth: experiment, simulation and theory [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1999, 389: 55-79.

Microscale Self-Similarity Phenomenon of RM Instability on the Copper/Helium Interface with Molecular Dynamics Simulation

DING Yu, HUANG Shenghong

(CAS Key Laboratory of Mechanical Behavior and Design of Materials, Department of Modern Mechanics,
University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

Abstract: The Richtmyer-Meshkov instability (RMI) under extreme shock conditions has important academic and engineering significance in the field of inertial confinement fusion (ICF). Present macroscopic hydrodynamic methods are difficult to be directly applied to RMI in extreme conditions due to the lack of

proper models and parameters in such states, while the microscopic results obtained by molecular dynamics (MD) are also difficult to be applied directly in macroscopic scale simulation due to computational cost. To understand the connection between macroscopic and microscopic RMI, the RMI evolution on copper-helium interface at different micro scales under different piston shock conditions (6–15 km/s) was simulated by the molecular dynamics method based on embedded-atom potential (EAM) models. Firstly, the RMI evolution obtained by MD was compared with available literature macroscopic results under similar conditions. Phenomenological similarity results between macroscopic and microscopic RMI is confirmed. The evolution histories of initial sinusoidal disturbance (amplitude/wave length ratio 0.20–0.05) at different incident shock wave speeds (11.7–20.6 km/s) and different scales (7.3–145.0 nm) from RMI simulations were further compared and analyzed. It is found that all amplitude evolution curves behave with self-similarity under same shock and boundary conditions, all main parameters vary in accordance with prediction of theoretical model. Although there exists some extent of discrepancy, similar amplitude evolution characteristics results are obtained by microscopic and macroscopic simulations.

Keywords: Richtmyer-Meshkov instability; extreme conditions; phenomenological similarity; self-similarity; molecular dynamics

基于 PPM 的界面压缩方法研究

陈 芳^{1,2}, 李 平¹, 刘 坤¹, 柏劲松¹, 林健宇¹, 季路成²

(1. 中国工程物理研究院流体物理研究所, 四川 绵阳 621999;
2. 北京理工大学宇航学院, 北京 100081)

摘要: 高精度多组分分段抛物线法 (Piecewise Parabolic Method, PPM) 在对可压缩多相流问题进行模拟计算时, 在不同组分交界面上存在界面扩散。为此, 通过引入包含界面压缩和密度修正的人工界面压缩方法, 抑制界面扩散现象。采用一个界面函数表示运动的物质界面, 在多组分质量守恒方程和输运方程中添加考虑人工压缩和人工黏性的压缩源项, 并在伪时间内采用二阶中心差分法和两步 Runge-Kutta 方法进行离散求解, 采用 Strang 型分裂格式实现了整体算法的时间二阶精度。一维与二维数值模拟试验表明, 结合人工界面压缩之后的 PPM 能有效抑制界面上数值扩散问题, 在长时间的数值模拟中, 人工界面压缩能够将扩散界面厚度维持在一定网格之内且保持界面形状不改变, 尤其对于涉及稀疏波的问题, 如激波引起的水中气泡坍塌, 界面压缩效果更为显著。

关键词: 分段抛物线法; 可压缩多相流; 界面压缩; 激波捕捉

中图分类号: O359.1

文献标识码: A

可压缩多相(多介质)流动中激波与界面的相互作用通常会产生许多复杂且重要的现象, 例如: Richtmyer-Meshkov 不稳定性现象^[1-2]、流动混合现象^[3-4]等。这些现象具有广泛的应用, 如: 超声速混合^[5]、超声速燃烧^[6]、激波碎石技术^[7]、水下爆炸^[8]、激波与气泡相互作用^[9]以及激波与液滴相互作用^[10]等。然而, 人们对于涉及高密度比和强冲击波的激波与界面相互作用的现象并未完全理解。现有的针对可压缩多相流动的数值模拟方法也无法完全准确地解释以上现象, 因此亟待提高数值方法的计算精度以研究激波与界面的相互作用。

现有的模拟可压缩多相流动的高精度数值方法有很多, 其中, 由 Colella 和 Woodward 提出的分段抛物线方法 (Piecewise Parabolic Method, PPM) 是一种鲁棒性很好的间断捕捉方法。该方法采用分段抛物插值, 在区域边界上采用双波近似黎曼求解器, 能够有效地处理可压缩流动中的间断问题, 如激波与接触间断^[11]。在光滑区域, PPM 具有空间三阶精度和时间二阶精度。近年来, 人们针对 PPM 进行了一系列的研究, 主要包括数值算法^[12]和实际应用^[13-15]两方面。算法方面, 在 PPM 中引入了 5 方程模型^[16], 使其能够模拟具有刚性气体状态方程的多组分流动 (Multi-Fluid Flows), 随后发展的两步 Lagrange-Remap 型多组分 PPM (Multi-Fluid PPM, MFPPM)^[11]可以计算具有一般形式状态方程的可压缩多流体问题^[12]。柏劲松等^[13-15]基于 MFPPM, 采用大涡模拟研究了界面不稳定性问题和湍流混合等问题。但在这些研究中可以发现, 由于数值扩散的存在, 不同流体介质间的界面会随着计算时间的增加而变宽, 降低了 MFPPM 的计算精度。此外, 采用 MFPPM 计算一些实际不可混溶问题时数值扩散非常大, 以致丧

* 收稿日期: 2018-10-18; 修回日期: 2018-11-16

基金项目: 国家自然科学基金(11532012, 51676015)

作者简介: 陈 芳(1990—), 女, 博士研究生, 主要从事可压缩多相流模拟研究.
E-mail: cocochen1929@163.com

通信作者: 李 平(1966—), 男, 博士, 研究员, 主要从事爆炸力学及冲击动力学理论与数值计算方法研究.
E-mail: lp0703@263.net

失其准确性。因此,在准确模拟可压缩流动界面问题中,如何抑制界面的数值扩散是研究的一个重点,同时这也是扩散界面方法研究的热点之一。

扩散界面方法是现有的研究可压缩多相流动问题的一类重要研究方法。该方法将流体间的界面视为具有一定厚度的数值混合区域。如何利用合适的热力学状态方程和界面间断条件正确表达混合区域的特征是研究的一个难点。扩散界面方法常采用质量分数^[17]、体积分数^[18]或比热^[19]捕捉界面。在此类方法中界面的扩散问题可以通过界面的锐化处理进行控制^[20]。目前主要有:THINC方法^[21-24]、反扩散方法^[25-27]和界面压缩方法^[28-30]。其中,Shukla等^[29-30]在考虑人工压缩和人工黏性后,提出了包含界面压缩和密度修正的人工界面压缩(Artificial Interface Compression, AIC)方法,能够在长时间的数值计算中保持界面宽度在一定计算网格厚度内,同时维持界面形状不变。该方法用界面函数捕捉运动的物质界面,并限制了界面压缩的范围,能够保证即使发生界面的合并或破碎等拓扑变化时也不会出现局部极值,能够准确模拟具有大变形的可压缩多相流动问题。

本研究在原MFPPM程序中引入AIC以实现界面压缩,并由此模拟计算一维和二维的可压缩两流体流动问题,验证方法的有效性和准确性。

1 控制方程

对于两相流动问题,定义单调且光滑的界面函数 ϕ 来表示流体间的界面, $0 \leq \phi \leq 1$ 。在界面两边的流体中该函数值分别为0和1,也可以将 ϕ 视为流体1的体积分数,则对于流体2有 $\phi_2=1-\phi$ 。界面的运动可以用界面函数的对流方程来表示。

控制方程采用5方程守恒模型^[12]

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{L}(\mathbf{U}) = \mathbf{S}(\mathbf{U}), \quad \mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho_1 \phi \\ \rho_2(1-\phi) \\ \rho \mathbf{u} \\ \rho e \\ \phi \end{pmatrix}, \quad \mathbf{L}(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} \nabla \cdot (\rho_1 \phi \mathbf{u}) \\ \nabla \cdot [\rho_2(1-\phi) \mathbf{u}] \\ \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) + \nabla p \\ \nabla \cdot [(\rho e + p) \mathbf{u}] \\ \mathbf{u} \cdot \nabla \phi \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} \rho_1 u_0 \mathbf{n} \cdot \nabla [\varepsilon_h |\nabla \phi| - \phi(1-\phi)] \\ -\rho_2 u_0 \mathbf{n} \cdot \nabla [\varepsilon_h |\nabla \phi| - \phi(1-\phi)] \\ 0 \\ 0 \\ u_0 \mathbf{n} \cdot \nabla [\varepsilon_h |\nabla \phi| - \phi(1-\phi)] \end{pmatrix} \quad (1)$$

式中: ρ_1 、 ρ_2 、 p_1 、 p_2 分别为两流体的密度和压力, $\mathbf{u}=(u, v, w)^T$ 为 x 、 y 和 z 3个方向的速度, e 为内能, u_0 为常数。方程组(1)描述的是不可混溶、组分间无相互反应的无粘流动,且忽略了表面张力和其他外力的影响。混合区的密度、压力和总内能分别为

$$\rho = \sum_i \phi_i \rho_i, \quad p = \sum_i p_i \phi_i, \quad \rho e = \sum_i \phi_i \rho_i e_i, \quad i = 1, 2 \quad (2)$$

式中: ρ_i 、 p_i 和 e_i 分别表示第*i*个组分的密度、压力和内能。状态方程为

$$p = p_i(\rho_i, \rho_i e_i), \quad i = 1, 2 \quad (3)$$

当两流体采用理想气体状态方程或刚性气体状态方程时,5方程模型可简化为连续方程为 $\rho_t + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0$ 的4方程模型。该4方程模型已被成功应用于分析激波与界面相互作用的研究中^[19, 29, 31]。值得注意的是,5方程模型不仅仅可以与本研究中提到的状态方程相结合,还能与其他更复杂甚至列表式的状态方程联立求解,如文献[29]。完整的控制方程模型由(1)式和(3)式给出。

选择如下的界面函数形式

$$\phi = \frac{1}{2} \left[1 \pm \tanh \left(\frac{d}{2\varepsilon_h} \right) \right] \quad (4)$$

式中: ε_h 是与网格尺寸相关的一个小数, $\varepsilon_h = \frac{\Delta x}{2} = \frac{\Delta y}{2} = \frac{\Delta z}{2}$ 。 d 表示到初始界面中心位置的符号距离($d = x - x_0$ 或 $d = r - r_0$, x_0 是初始界面的中心, r_0 为气泡的初始半径)。

2 数值方法

采用 Strang 型分裂格式实现整体算法的时间二阶精度, 具体做法是: 先将含有源项的控制方程分裂为不含源项的对流方程和含源项的压缩方程, 采用界面压缩方法对含源项的压缩方程进行计算得到密度和界面函数, 然后采用 PPM 计算不含源项的对流方程, 之后交换压缩方程和对流方程的计算顺序, 再进行计算, 经过后一个计算得到的变量值就是所需的初始变量在下一时刻的值。

$$\mathbf{U}^{n+2} = \mathbf{C} \mathbf{p}_{xy}^{\Delta t} \mathbf{p}_{yx}^{\Delta t} \mathbf{C} \mathbf{U}^n \quad (5)$$

式中: \mathbf{U}^n 表示在 n 时刻的原始变量值; \mathbf{C} 表示在伪时间内的压缩处理; $\mathbf{p}_{xy}^{\Delta t}, \mathbf{p}_{yx}^{\Delta t}$ 表示两个时间步 $2\Delta t$ 内的 PPM 计算, 只计算 ϕ 和 ρ_i 。

2.1 PPM

PPM 是一种高精度计算格式, 在光滑区具有空间三阶精度和时间二阶精度, 主要计算步骤如下: (1) 利用分段抛物插值定义密度、速度和压力等物理量; (2) 利用双波近似黎曼求解器, 在网格边界上采用牛顿法获得时间平均的压力和速度; (3) 进行拉氏求解; (4) 将计算结果映射回静止的欧拉网格中。变量的抛物插值详见文献 [11]。在光滑区域内, PPM 能给出准确解, 但在间断上解的精度将下降。

2.2 界面压缩方法

不同的压缩源项对应不同的界面函数方程, 本研究采用

$$\phi_{\tau_1} = \mathbf{n} \cdot \nabla [\varepsilon_h |\nabla \phi| - \phi(1-\phi)] \quad (6)$$

式中: \mathbf{n} 表示界面法向, 一维时, $\mathbf{n} = \pm 1$; $\tau_1 = u_0 t$ 表示伪时间。该压缩源项并不会影响质量守恒性, 且其压缩的有效性也已被证实, 详见文献 [29–30]。对应的密度修正方程为

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial \tau_2} = H(\phi) \mathbf{n} \cdot [\nabla (\varepsilon_h \mathbf{n} \cdot \nabla \rho_i) - (1-2\phi) \nabla \rho_i], \quad i = 1, 2 \quad (7)$$

采用 $H[\phi] = (\phi(1-\phi))^2$ 函数来限制界面压缩的作用区域。由于界面函数值在计算中的大部分网格区域内为常数, 只在界面附近的小部分区域发生变化, 因此限定界面压缩作用区域能够有效地减少计算量。

在界面法线方向, 界面函数的梯度 $\nabla \phi$ 变化很快, 容易产生大的计算误差, 因此, 可以采用变化平缓的替代函数 ψ 来计算, 使得在近界面附近, 界面法向的计算不受界面函数梯度的影响。本研究采用 $\psi = \frac{\phi^\alpha}{\phi^\alpha + (1-\phi)^\alpha}$, $0 < \alpha < 1$ 。随着指数 α 值的增加, ψ 变陡, 取 $\alpha = 0.1$, 则 $0.1 \leq \psi \leq 0.9$ 。

在伪时间内采用二阶中心差分方法对界面压缩和密度修正项进行空间离散处理^[29], 时间推进采用两步 Runge-Kutta 方法^[32]。迭代停止的条件是变量 ϕ 和 ρ 的无穷范数分别小于一个小数 10^{-5} 和 10^{-4} 。由于 AIC 采用的是二阶中心差分方法, 压缩只作用在界面附近区域内, 在远界面处界面函数值保持为 0 或 1, 因此 AIC 不会影响远界面处的变量值, 从而不会影响 PPM 的精度。

值得注意的是, 在高密度比情况下, 可能出现局部密度为负的现象, 对于压缩项, 当 $\varepsilon_h \geq 0.5h$ (h 为网格尺寸) 时, 能够满足密度为非负。本研究在一维、二维模拟中, 分别采用 $\varepsilon_h^{1D}=0.5h$ 、 $\varepsilon_h^{2D}=0.72h$ 和均匀网格 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = h$ 。另外, $\Delta \tau_1 \leq h/2$, $\Delta \tau_2 \leq 2 \cdot h^2$, 满足稳定性条件。

3 算例与讨论

本节给出了一些分别采用 MFPPM 以及 MFPPM 结合 AIC 的一维、二维数值试验结果。为了方便, 所有算例都进行无量纲化处理, 且都采用均匀结构网格。

3.1 一维纯对流问题

首先考虑一个一维纯对流问题, 以证明 AIC 在 MFPPM 中的可行性。两流体均采用刚性气体状态方程 $p_i = (\gamma_i - 1)\rho_i e_i + p_i^\infty$, 其中: $\gamma_1 = 4.4$, $\gamma_2 = 1.4$, $p_1^\infty = 6 \times 10^8$, $p_2^\infty = 0$ 。描述的是一维的水泡(流体 1)被空气(流体 2)包围, 压力均匀分布, 速度连续。计算区域长度为 1, 计算网格数为 100, 采用周期性边界条件, 初始条件为

$$(\rho, u, p) = \begin{cases} (1, 100, 1) & 0.3 \leq x \leq 0.7 \\ (0.1, 100, 1) & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$\phi = \frac{1}{2} \left[1 + \tanh \left(\frac{x - 0.3}{2\varepsilon_h^{1D}} \right) \right], \quad 0 \leq x \leq 0.5 \quad (8)$$

$$\phi = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh \left(\frac{x - 0.7}{2\varepsilon_h^{1D}} \right) \right], \quad 0.5 < x \leq 1 \quad (9)$$

图1给出了 $t=0.12$ 时刻的计算结果,其中,“□”和“●”分别代表原MFPPM的计算结果(Non-AIC)和MFPPM结合AIC后的计算结果(AIC)。从图1中可以看出,两者都与精确解(黑色直线)符合得较好,但AIC的结果更接近精确解。该算例证明了控制方程以及数值方法的正确性和有效性。

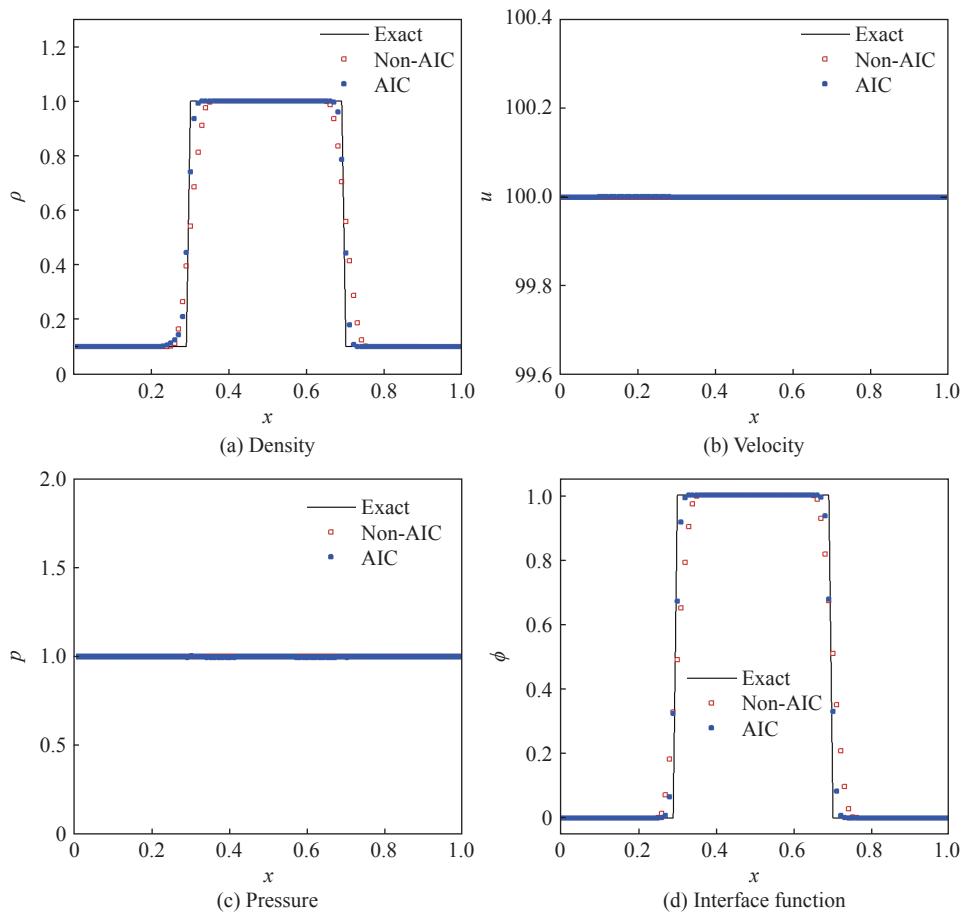


图1 一维纯对流问题

Fig. 1 Solution of the one-dimensional advection test

3.2 二维水中气泡塌陷问题

现考虑马赫数为1.72的激波诱导水中气泡塌陷问题,该问题具有广泛的物理研究和实际应用价值,如激波碎石、爆炸中热点的形成研究等^[33-34]。模型示意图如图2所示,初始界面分布为

$$\phi = \frac{1}{2} \left[1 + \tanh \left(\frac{r-1}{2\varepsilon_h^{2D}} \right) \right] \quad (10)$$

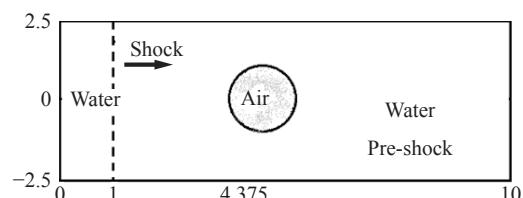


图2 水中气泡坍塌问题示意图(初始状态)

Fig. 2 Air cavity collapse in water test
(Description of the initial conditions)

在气泡中, $\phi = 0$; 在水中, $\phi = 1$ 。状态方程同上, 其参数见表1, 气泡初始半径为 $r_0 = 1$ 。

表1 水中气泡塌陷问题中状态方程参数及初始参数

Table 1 Equation of state parameters and the initial time data of an air cavity collapse in water

Material	$\rho / (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$	p / Pa	$u / (\text{m} \cdot \text{s}^{-1})$	$v / (\text{m} \cdot \text{s}^{-1})$	γ
Water (Post-shock)	1.325	1.915×10^4	68.52	0	4.4
Water (Pre-shock)	1	1	0	0	4.4
Air	0.001	1	0	0	1.4

图3给出了不同时刻的界面函数分布, 从左至右分别对应0.010、0.015、0.018和0.020时刻。图3中, 上、下图分别是经过、无经过界面压缩的结果。每幅图片的上、下半部分分别表示 800×400 和 1600×800 均匀计算网格的结果。从图3上、下两幅图的对比可以看出, 界面的压缩效果很明显, 尤其在上游界面有稀疏波的地方, 在 $y=0$ 的轴线上压缩最为显著。MFPPM结合AIC计算得到的计算网格数为 1600×800 的结果如图4所示。计算结果显示无非物理振荡, 且结果关于 $y=0$ 对称, 与文献[30, 35]符合较好, 验证了AIC方法的正确性和有效性。AIC的界面压缩特征使得界面形状更尖锐。图3和图4中的黑实线表示气泡的初始位置。

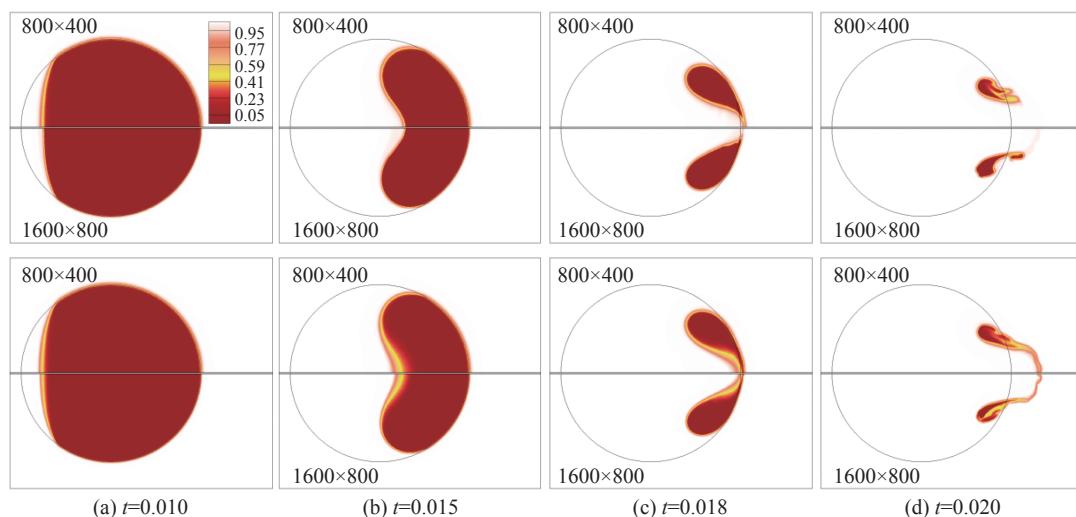


图3 水中气泡坍塌问题的界面函数分布图

Fig. 3 Air cavity collapse in water test (Mapping of the interface function)

在 $t=0.015$ 时刻, 界面函数的等值线($\phi=0.05, 0.5, 0.95$)以及沿 $y=0$ 的剖面如图5所示。其中, 左图的计算网格数是 200×100 , 右图是 1600×800 。可以看出, 经过AIC后的界面(蓝色)基本捕获在5个网格内。在远界面处MFPPM的计算结果与MFPPM结合AIC的计算结果一致。这说明界面压缩只在接触间断上有效, 在激波和稀疏波附近, 退化为MFPPM。界面函数的分布形状取决于混合区的密度分布, 界面的数值宽度由定义的界面函数确定, 这也解释了为何会出现图5中的分布形态和界面宽度。此外还可以看出, 粗网格有AIC的界面比细网格无AIC的界面还要略窄。显而易见, 在MFPPM中引入AIC可在整个计算过程中有效地抑制界面的扩散, 且保持界面形状不变。

3.3 二维空气-R22相互作用问题

该算例是为了模拟计算Haas等^[36]的一个实验, 关于本算例的研究也有很多, 详见文献[35]。模型示意图如图6所示, 入射激波马赫数为1.22, 初始界面分布为

$$\phi = \frac{1}{2} \left[1 + \tanh \left(\frac{r - 25}{2\epsilon_h^{2D}} \right) \right] \quad (11)$$

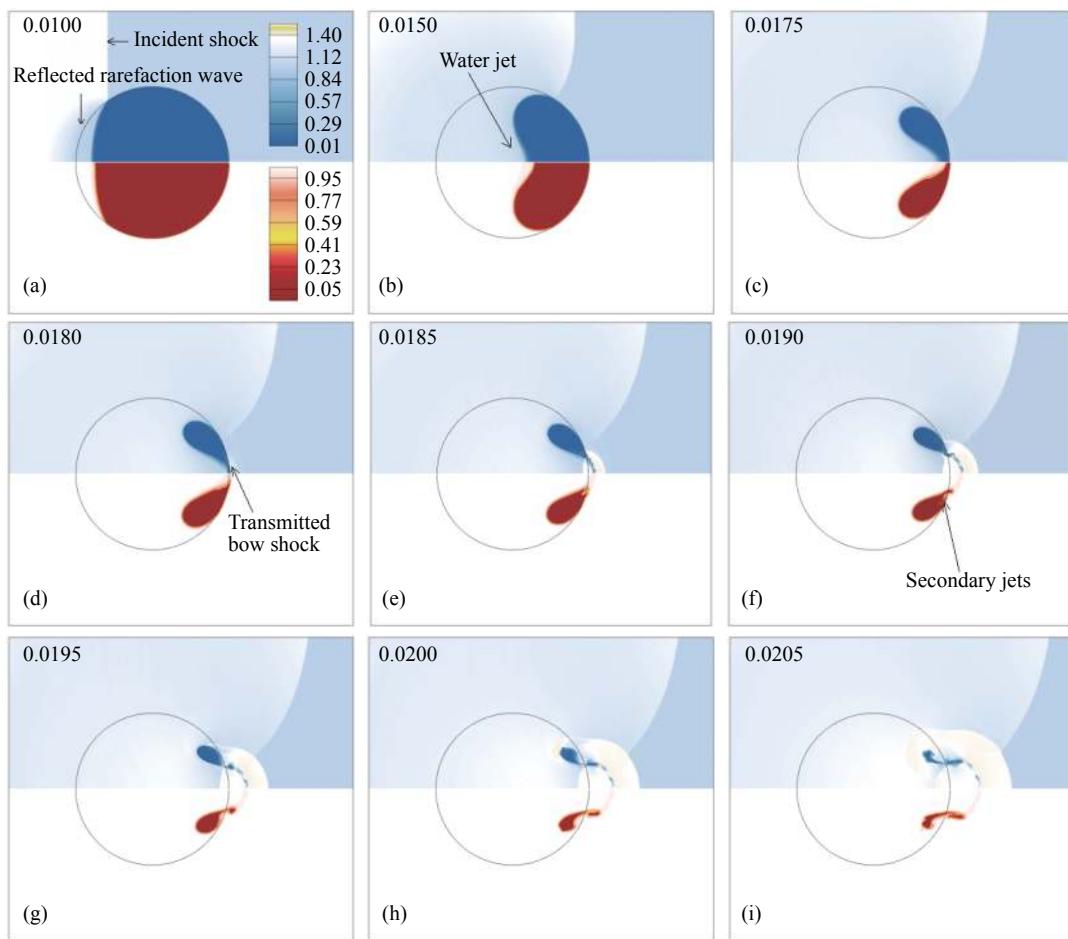
图4 水中气泡塌陷问题的密度(上)与界面函数(下)分布图 ($\Delta x = \Delta y = 0.00625$)

Fig. 4 Air cavity collapse in water test (Mapping of the density (top half) and the interface function (bottom half), computed with $\Delta x = \Delta y = 0.00625$)

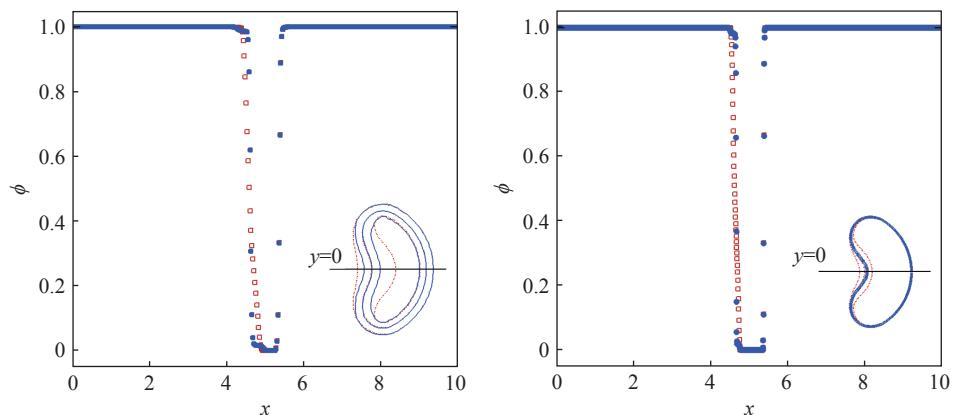


图5 轴线上的界面函数分布 (“●”和“□”分别表示有、无 AIC)

Fig. 5 Profile of the interface function along the axis $y = 0$ with (●) and without (□) AIC

在 R22 气柱中, $\phi = 0$; 在空气中, $\phi = 1$ 。采用理想气体状态方程, 初始时刻的参数见表 2, R22 气柱初始半径为 $r_0 = 0.025$ 。流场关于流动方向是对称的, 因此只模拟了上半部分流动区域。

上下边界采用反射性边界条件。图 7 显示了不同时刻的 R22 气柱, 其中实线为初始时刻气柱的位置, 网格尺寸为 $\Delta x/D = \Delta y/D = 0.00297$, Δx 、 Δy 和 D 分别表示 x 、 y 方向的网格大小及圆柱初始直径。每

幅图的上半部分是有 AIC 的结果, 下半部分是 MFPPM 的计算结果。为了看得更清晰, 这里只展示了气柱附近的局部情况。

图 8 给出了不同时刻的数值纹影图。每幅图的上半部分为有 AIC 的结果, 下半部分为 MFPPM 的计算结果, 红色实线表示初始时刻气柱的位置。从图 8 中可以看到入射激波、透射激波和反射激波。波的相互作用问题已在前人的研究中彻底进行了分析^[33, 36]。采用 MFPPM 计算得到的结果与文献 [35] 中结果符合较好, 包括大尺寸结构和界面的演化。另外, 两个模拟结果的气柱位置与结构基本相同, 在原 MFPPM 程序的模拟结果中出现了涡对结构扩散, 而采用 AIC 后, 在整个计算过程中, 即使在高速射流形成后, 界面依然保持其厚度。

表 2 空气-R22 气柱相互作用问题中的状态方程参数及初始参数
Table 2 Equation of state parameters and the initial time data of air-R22 shock-cylinder interaction

Material	$\rho/(\text{kg}\cdot\text{m}^{-3})$	p/MPa	$u/(\text{m}\cdot\text{s}^{-1})$	$v/(\text{m}\cdot\text{s}^{-1})$	γ
Air (Post-shock)	1.686	0.159	-113.5	0	1.400
Air (Pre-shock)	1.225	0.101	0	0	1.400
R22	3.863	0.101	0	0	1.249

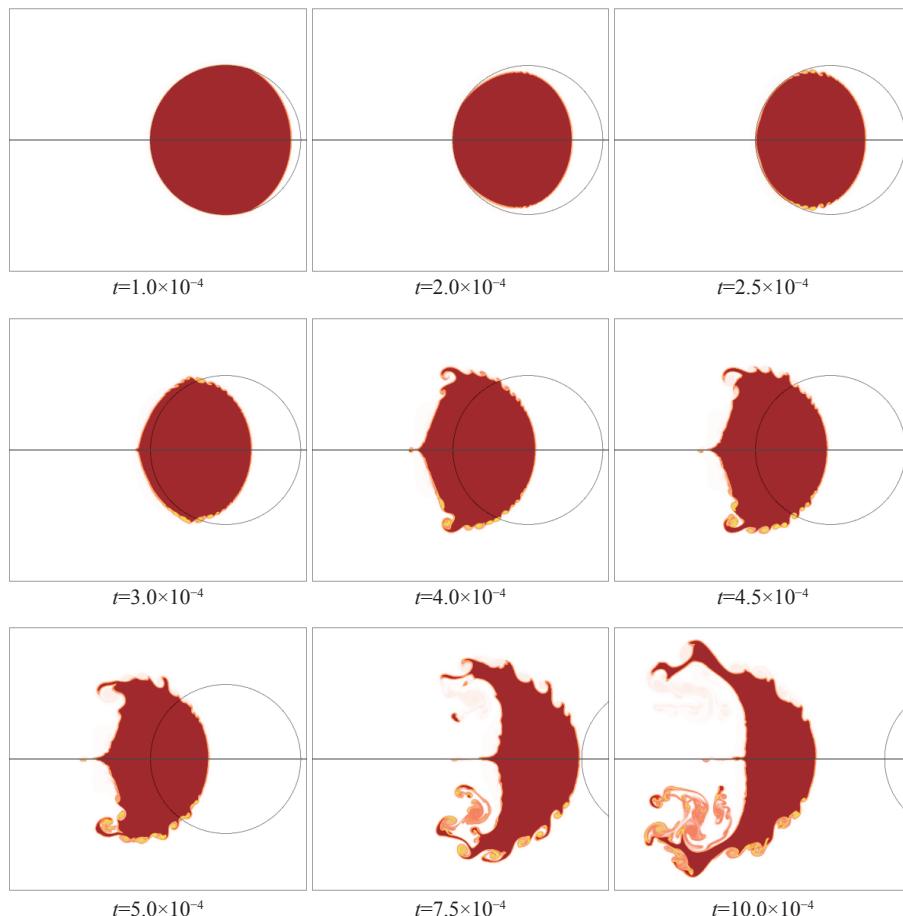


图 7 不同时刻的界面分布

Fig. 7 Mapping of the interface function at different time

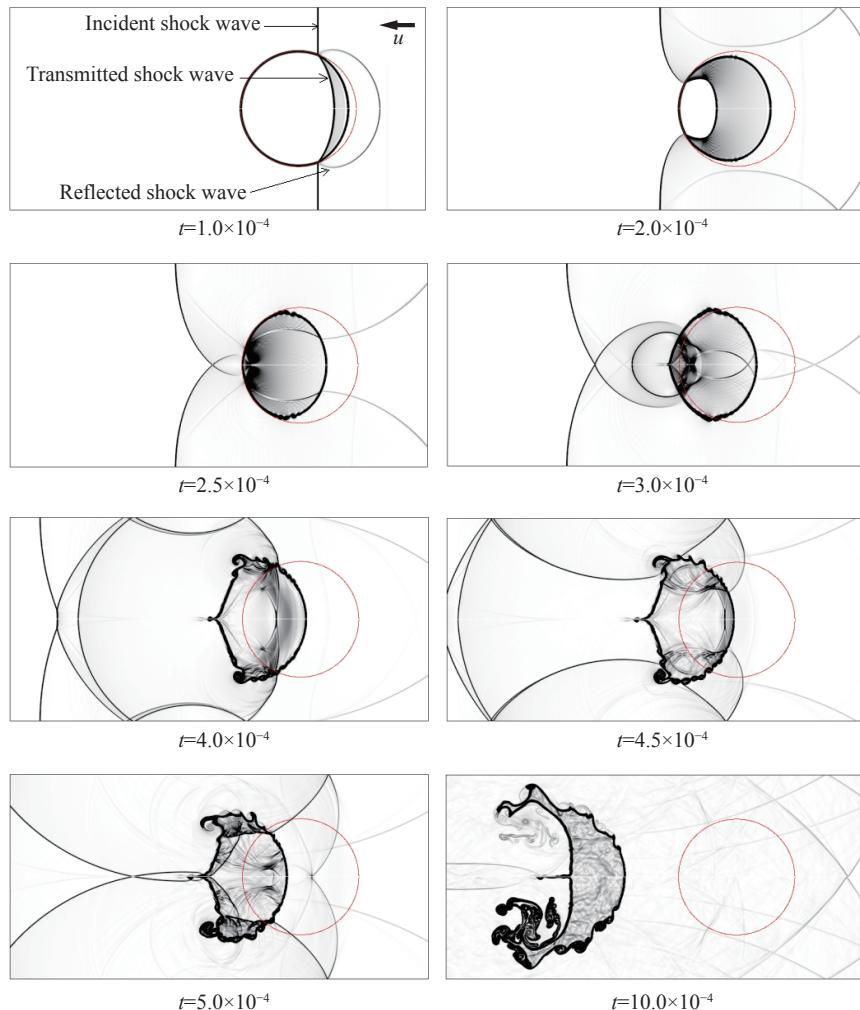


图 8 空气-R22 激波与气柱相互作用的数值纹影图

Fig. 8 Numerical schlieren diagram for the air-R22 shock-cylinder interaction problem

经 AIC 处理后得到的不同涡对形状以及更好的不规则结构与实验^[36]以及文献模拟结果^[35]吻合较好, 此处不再列出。当激波经过气柱上游界面后, 会首先在气柱迎风方向的上游界面附近发展界面不稳定性, 当激波经过气柱之后, 界面上会出现卷起。激波经过之后界面的演化和发展情况表明, Kelvin-Helmholtz 不稳定性引起了界面的变形、翻转和破碎, 最后形成湍流混合。

4 结 论

为控制计算可压缩两相流时界面上的数值扩散, 在 PPM 中引入了人工界面压缩方法。采用 5 方程准守恒模型和有压缩源项的人工界面压缩(AIC)实现了对扩散界面的有效处理, 采用 Strang 型算子分裂技术实现了整体格式的时间二阶精度。远界面上, 界面函数值为常数(0 或 1), 因此空间精度可以保持为原 PPM 的三阶精度。在 PPM 中引入 AIC 适用于高密度比、强冲击波情形。数值模拟试验表明该方法能够有效地处理间断, 尤其是接触间断。PPM 结合 AIC 能够顺利捕捉不同介质间的界面, 在长时间的数值模拟中, 能够控制界面厚度在一定数值网格范围之内, 并保持界面形状不发生改变。总的来说, 在 PPM 中引入 AIC 处理, 有效地解决了计算中的界面扩散问题, 为准确模拟可压缩两相流动提供了一种思路。其他应用方面以及涉及三维情形的研究还需投入更多精力。

参考文献:

- [1] MESHKOV E E. Instability of the interface of two gases accelerated by a shock wave [J]. *Fluid Dynamics*, 1969, 4(5): 101–104.
- [2] BROUILLETTE M. The Richtmyer-Meshkov Instability [J]. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 2002, 34(34): 445–468.
- [3] LOMBARDINI M, PULLIN D I, MEIRON D I. Turbulent mixing driven by spherical implosions (Part 1): flow description and mixing-layer growth [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2014, 748(2): 85–112.
- [4] LOMBARDINI M, PULLIN D I, MEIRON D I. Turbulent mixing driven by spherical implosions (Part 2): turbulence statistics [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2014, 748(10): 113–142.
- [5] CLEMENS N T, MUNGAL M G. Large-scale structure and entrainment in the supersonic mixing layer [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1995, 284(284): 171–216.
- [6] KAWAI S, LELE S K. Large-eddy simulation of jet mixing in supersonic crossflows [J]. *American Institute of Aeronautics and Astronautics*, 2010, 48(9): 2063–2083.
- [7] JOHNSEN E, COLONIUS T. Shock-induced collapse of a gas bubble in shockwave lithotripsy [J]. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 2008, 124(4): 2011–2020.
- [8] KLASEBOER E, HUNG K C, WANG C, et al. Experimental and numerical investigation of the dynamics of an underwater explosion bubble near a resilient/rigid structure [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2005, 537(537): 387–413.
- [9] RANJAN D, OAKLEY J, BONAZZA R. 3D shock-bubble interactions [J]. *Physics of Fluids*, 2013, 25(9): 117–140.
- [10] THEOFANOUS T G. Aerobreakup of newtonian and viscoelastic liquids [J]. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 2011, 43(1): 661–690.
- [11] COLELLA P, WOODWARD P R. The piecewise parabolic method (PPM) for gas-dynamical simulations [J]. *Journal of Computational Physics*, 1984, 54(1): 174–201.
- [12] 马东军, 孙德军, 尹协远. 高密度比多介质可压缩流动的PPM方法 [J]. *计算物理*, 2001, 18(6): 517–522.
MA D J, SUN D J, YIN X Y. Piecewise parabolic method for compressible flows of multifluids with high density ratios [J]. *Chinese Journal of Computational Physics*, 2001, 18(6): 517–522.
- [13] BAI J S, WANG B, WANG T, et al. Numerical simulation of the Richtmyer-Meshkov instability in initially nonuniform flows and mixing with reshock [J]. *Physical Review E*, 2012, 86(6): 066319.
- [14] BAI J S, ZOU L Y, WANG T, et al. Experimental and numerical study of shock-accelerated elliptic heavy gas cylinders [J]. *Physical Review E*, 2011, 82(2): 056318.
- [15] XIAO J X, BAI J S, WANG T. Numerical study of initial perturbation effects on Richtmyer-Meshkov instability in nonuniform flows [J]. *Physical Review E*, 2016, 94(1): 013112.
- [16] SHYUE K M. A fluid-mixture type algorithm for compressible multicomponent flow with van der Waals equation of state [J]. *Journal of Computational Physics*, 1999, 156(1): 43–88.
- [17] SHYUE K M. An efficient shock-capturing algorithm for compressible multicomponent problems [J]. *Journal of Computational Physics*, 1998, 142(1): 208–242.
- [18] ALLAIRE G, CLERC S, KOKH S. A five-equation model for the simulation of interfaces between compressible fluids [J]. *Journal of Computational Physics*, 2002, 181(2): 577–616.
- [19] JOHNSEN E, COLONIUS T. Implementation of WENO schemes in compressible multicomponent flow problems [J]. *Journal of Computational Physics*, 2006, 219(2): 715–732.
- [20] KOKH S, ALLAIRE G. Numerical simulation of 2-D two-phase flows with interface [C]/TORO E F. Godunov Methods. Boston, MA: Springer, 2001: 513–518.
- [21] II S, XIE B, XIAO F. An interface capturing method with a continuous function: the THINC method on unstructured triangular and tetrahedral meshes [J]. *Journal of Computational Physics*, 2014, 259: 260–269.
- [22] SHYUE K M, XIAO F. An Eulerian interface sharpening algorithm for compressible two-phase flow: the algebraic THINC approach [J]. *Journal of Computational Physics*, 2014, 268(2): 326–354.
- [23] XIAO F, HONMA Y, KONO T. A simple algebraic interface capturing scheme using hyperbolic tangent function [J]. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 2005, 48(9): 1023–1040.
- [24] XIAO F, II S, CHEN C. Revisit to the THINC scheme: a simple algebraic VOF algorithm [J]. *Journal of Computational Physics*, 2011, 230(19): 7086–7092.
- [25] KOKH S, LAGOUTIÈRE F. An anti-diffusive numerical scheme for the simulation of interfaces between compressible fluids by means of a five-equation model [J]. *Journal of Computational Physics*, 2010, 229(8): 2773–2809.

- [26] FRIESS M B, KOKH S. Simulation of sharp interface multi-material flows involving an arbitrary number of components through an extended five-equation model [J]. *Journal of Computational Physics*, 2014, 273(273): 488–519.
- [27] DELIGANT M, SPECKLIN M, KHELLADI S. A naturally anti-diffusive compressible two phases Kapila model with boundedness preservation coupled to a high order finite volume solver [J]. *Computers and Fluids*, 2015, 114(1): 265–273.
- [28] OLSSON E, KREISS G, ZAHEDI S. A conservative level set method for two phase flow II [J]. *Journal of Computational Physics*, 2007, 225(1): 785–807.
- [29] SHUKLA R K, PANTANO C, FREUND J B. An interface capturing method for the simulation of multi-phase compressible flows [J]. *Journal of Computational Physics*, 2010, 229(19): 7411–7439.
- [30] SHUKLA R K. Nonlinear preconditioning for efficient and accurate interface capturing in simulation of multicomponent compressible flows [J]. *Journal of Computational Physics*, 2014, 276(1): 508–540.
- [31] FREUND J B, SHUKLA R K, EVAN A P. Shock-induced bubble jetting into a viscous fluid with application to tissue injury in shock-wave lithotripsy [J]. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 2009, 126(5): 2746–2756.
- [32] SHU C W. Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws [C]//QUARTERONI A. Advanced Numerical Approximation of Nonlinear Hyperbolic Equations: Lecture Notes in Mathematics (Vol.1697). Berlin, Heidelberg: Springer, 1998: 325–432.
- [33] NOURGALIEV R R, DINH T N, THEOFANOUS T G. Adaptive characteristics-based matching for compressible multifluid dynamics [J]. *Journal of Computational Physics*, 2006, 213(2): 500–529.
- [34] HU X Y, KHOO B C. An interface interaction method for compressible multifluids [J]. *Journal of Computational Physics*, 2004, 198(1): 35–64.
- [35] SHYUE K M. A wave-propagation based volume tracking method for compressible multicomponent flow in two space dimensions [J]. *Journal of Computational Physics*, 2006, 215(1): 219–244.
- [36] HAAS J F, STURTEVANT B. Interaction of weak shock waves with cylindrical and spherical gas inhomogeneities [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1987, 181(1): 41–76.

Interface Compression Technique in PPM

CHEN Fang^{1,2}, LI Ping¹, LIU Kun¹, BAI Jingsong¹, LIN Jianyu¹, JI Lucheng²

(1. Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang 621999, China;

2. School of Aerospace Engineering, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

Abstract: This paper describes an artificial interface compression technique for the multi-fluid piecewise parabolic method (PPM). The proposed approach enables the simulation of interfaces between compressible multi-fluid flows with high density ratios and strong shock waves. A compression source term incorporated both interface compression and density correction is added to the mass conservation equation. The compression source term is solved in pseudo-time steps using the interface compression technique and the advection part is solved by multi-fluid PPM. The Strang splitting algorithm achieves second-order accuracy by combining the solutions of the advection operator and the interface compression operator. Numerical tests on the interaction of shock waves with interfaces in compressible multi-fluid flows reveal that multi-fluid PPM combined with the artificial interface compression technique can effectively prevent the smearing phenomenon, which is often observed at the contact interface. For long-time simulations, artificial interface compression with interface sharpening can constrain the thickness of the diffused interface to a few cells and maintain the interface profile. This artificial interface compression technique works well with multi-fluid PPM and the effect is obvious. It is a significant step in the accurate simulation of the collapse of air cavities in water, which involves strong rarefaction waves.

Keywords: piecewise parabolic method; compressible multi-fluid flows; interface compression; shock capturing