

国家自然科学基金资助项目

数值模拟方法和 运动界面追踪

刘儒勋 王志峰 编著

中国科学技术大学出版社

2001·合肥

图书在版编目(CIP)数据

数值模拟方法和运动界面追踪/刘儒勋, 王志峰编著. —合肥:
中国科学技术大学出版社, 2001. 10
ISBN 7-312-01288-4

I. 数… II. ①刘… ②王… III. 动态—界面—跟踪—数值模
拟 IV. O357.4

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2001) 第 043845 号

中国科学技术大学出版社出版发行

(安徽省合肥市金寨路 96 号 230026)

合肥学苑印刷厂印刷

全国新华书店经销

开本: 850×1168/32 印张: 10.25 字数: 301 千

2001 年 10 月第 1 版 2001 年 10 月第 1 次印刷

印数: 1—3000 册

定价: 12.00 元

序 言

—

原本是计划写一本适合中国科技大学数学系高年级本科生和研究生使用的有关偏微分方程数值方法的教材，但是想想国内外冠以这个名字的编著何其多哉！再看看这类编著的内容、目录，差别也不甚悬殊。这使我们犹豫，怎么办？回顾多年来相关课程的教与学，学生对于该课程内容和方法之罗列也时有厌倦情绪，不能不说在一定程度上影响了学生学习和掌握数值计算和数值模拟方法的积极性。这非常可惜！所以，我们希望能够找到一种新的模式和程序，让这门重要的课程的教与学都能出现新面貌，变得活跃起来，这是我们所热切期望和追求的事情。

近年来，在研究生的教学中我们进行了实验，就是采用研究课题带方法的教学。特别是根据当前国内外的热门研究课题“运动界面追踪的数值方法研究和应用”，我们开设了同名的研究生讨论班，它就很受关注和欢迎，也取得了令人惊喜的效果。看来，“偏微分方程数值方法”一课的问题，似乎在于方法、格式的过于堆砌，却不见其实际的应用功效。

因此，我们决定放弃“偏微分方程数值方法”的题目，而采用“数值模拟方法和运动界面追踪”的名字来写这本教材。其一，对于偏重理论的中国科技大学数学系的学生来说大有好处，给他们展现出一片新天地，唤起他们联系实际解决实际问题的兴趣。其二，运动界面追踪的数值方法内容首先强调数学模型，它包括活动边界即 Stefan 问题，更包含多相、多组分和各类间断现象的复杂现实问题，而要追踪这种运动的界面，所需要的数值方法可

以说集中了近代最新的发展。其三，运动界面追踪问题具有非常现实的意义，当前国内外非常重视和热门，特别是美国的数值数学和计算物理工作者，许多人从事或开始进行这方面的研究。因为它涉及科学工程计算、水利水电、计算物理、化学和生物工程、材料加工、国防建设，等等，既有极其深刻的现实价值，又有重大的理论意义。

当然，既然是这个名字，就不能名不副实，就得真刀真枪地教给学生解决运动界面追踪问题的物理或者工程背景，特别是有效的数值方法。这样一来，必然使本书的写作增加了很大的难度，也给我们提出了新的要求。作为编著者，我们首先必须了解和掌握这方面的内容和发展，而且还应当实际地进行这项课题的研究和应用。好在我们已经有了两年的学习、教学和实践经验，同时我们也得到了国家自然科学基金同名项目的大力支持。这就是我们写作本书的原由。

可是，就我们的知识和能力所及，要写好运动界面追踪数值模拟方法的问题和发展，可能会挂一漏万。所以，我们非常愿意专家和读者们品头论足，批评指正，希望能为改进当前偏微分方程数值方法或者计算流体力学的教学做出贡献。

二

事实上，运动界面问题的提出和讨论可以追溯到一个多世纪以前。1889年，Stefan最早研究了所谓“活动边界”问题的一个典型实例——冰水问题，因此，该类问题通常又称为Stefan问题。在生活中经常遇到的诸如石蜡熔化、水结冰、泄漏在海面上的石油的扩散等边界随时间变化的问题，都是这种活动边界问题。

此外，“自由面问题”，诸如水波或波浪等的变化和发展，也与我们的生活密切相关。

又比如结晶增长、固化和熔化界面问题等涉及固体中的热传

导问题，1959 年 Carslaw 和 Jaeger 就出版了一本专著《Conduction of Heat in Solids》。

另外还有一类问题，如多相、多组分的气体 and 液体等的内部速度、压力、密度等所产生的间断，或者内部产生的各种不稳定现象。而这些间断或不稳定状态，会依据一定的物理或化学的规律移动变化。

今天，人们特别关注的问题是如何采用数值模拟的手段，对上述这些问题进行更加复杂、细微和深入的研究，这就是“运动界面追踪的数值方法研究和应用”所肩负的任务，其意义关系到物理、化学、生物等多个学科的研究，和各种加工工业的高科技发展。例如，它可以涉及到凝固和熔化（Solidification and Melting）、蒸发和凝结（Evaporation and Condensation）、多孔介质流或渗流（Flow through Porous Media or Seepage）、海水侵蚀岩体（Intrusion）、沉积和渗透（Sedimentation and Infiltration）、波的传播（Wave Propagation）、溢洪道（Spillway）和过水闸门（Sluice Gate）、润滑（Lubrication）、金属的铸造和熔焊（Casting and Welting）、玻璃（Glass）和塑料（Plastic），以及石油（Oil）加工、空间飞行器的设计（Space Vehicle Design）、食品保鲜（Preservation of Foodstuffs）、化学反应及扩散过程（Chemical and Diffusion）、电子器件的制作，等等。

可以想像，利用计算机再现结晶的形成和生长、液体中气泡的逸出和破裂、火焰的点燃和闪烁、浇铸和注塑等加工成型工业的内在机理和过程，甚至一只胚胎的生长和发育，等等，那会是多么有意义！这不正是人类揭示自然、开创未来的进步吗？

读者由此不难看到，运动界面追踪问题所要求的数值方法必然是稳定、可靠和有效的，尤其是所谓高分辨率的。而且，因为运动边界本身的追踪和基本物理场的模拟是互相联系和相辅相成的，因而在求解的格式和程序上也就更有新意。

三

本课的目标当然不是进行运动界面追踪方法的研究和应用，而是以这个问题作为一条线索，将数学模型的讨论、数值方法特别是近代发展起来的有效方法的介绍和讲授，贯穿在同一的目的之下。

所以，本课的基本内容可以分为三部分：

1. 向学生介绍运动界面问题的一些有意义、又有趣的数学模型。

这里既有经典的 Stefan 问题或者活动边界问题、自由面问题，又有现在具有较大难度的运动界面基本物理场的复合模型。我们希望读者能够看到它们的实际物理意义和应用前景，从而产生出兴趣和解决它们的愿望。

2. 介绍和讲授当代发展的数值方法。

包括解决运动界面追踪的高分辨率方法和重构方法，以及数值模拟基本物理场的数值方法，特别是如何协调运动界面追踪计算和对主场数值模拟的关系。

在这里，自然要对有限差分方法的基本理论和设计方法，特别是 Upwind 或者特征线的概念和思想，弱解或者间断解的理论和方法，例如 Riemann 问题、Roe 的解法和各种重要的高分辨率方法等等进行讲授。此外，对于间断有限元和有限体积法也将做简单而实用的介绍。

3. 利用我们介绍的数值方法和程序，实际地去进行具有典型性的运动界面数学模型的计算和模拟。

这就是说，本书中另一个重要的内容，就是把所讲授的数值方法，利用典型的运动界面问题的例子，进行数值模拟实验，进行比较、分析和评论。从中对于各种数值方法，说明其特点、适应性和存在的问题，以及需要注意的地方。

本课除了极其必须的作业之外，非常强调进行实际的运动界

面的数值模拟实验，作为课程的重要组成部分的“project”。全课程共有两次这种计算机数值模拟实习，要求学生能够切实地用学到的方法去模拟两个运动界面的变化和发展，并且写出实验报告。

本书的第一部分，首先介绍运动界面问题数学模型的物理背景和具体数学表达，而后概括地介绍当前追踪方法的历史和发展。第二部分是基本物理场或者主场的数值方法的比较系统的介绍，也包括运动界面的细微和精致的重构方案和技术。第三部分是应用算例，或者说各种不同数值方法在典型运动界面模拟中的应用和结果分析、比较。

在本书的每一节中都给出了相当重要、而且尽可能是近期的、足够的参考文献，使读者可以进一步地查阅、学习，这对于有志于这方面研究和应用的读者而言，或许有很多益处。这也是我们非常乐于看到的。希望它能够唤起更多的国内学生和学者的兴趣，共同为我们国家的运动界面追踪问题的数值研究和应用开创新的局面。

书中部分数值算例由李宏博士、汪继文博士提供，在此深表谢意。书后附录给出了 6 个主要的数值算例的源程序代码。而且书中所有的数值算例程序都整理在一张软盘中，但不随书出售，读者如果需要，可与作者或责任编辑联系。

我们也只是刚刚涉足运动界面追踪数值方法这一领域，所做的工作也很有限，特别是在实际应用方面十分欠缺，书中错误、疏漏在所难免，恳请广大读者批评指正。

编著者 刘儒勋
王志峰

2001 年 8 月于中国科技大学

目 次

序 言	I
第 1 章 运动界面问题的数学模型	1
第 1 节 经典的活动边界问题 (Stefan 问题)	1
1-1 单相 Stefan 问题	1
1-2 两相 Stefan 问题	3
1-3 二维活动边界问题	5
第 2 节 浅水波方程和自由面流模型	6
第 3 节 流体体积函数的控制模型	11
第 4 节 非耦合型和耦合型的主场数学模型	17
4-1 非耦合型的数学模型	18
4-2 耦合型的主场模型	20
参考文献	20
第 2 章 运动界面追踪问题的数值方法评述	23
第 5 节 活动界面追踪问题的回顾	24
第 6 节 自由面问题和格子类方法	31
第 7 节 现代运动界面追踪数值方法介绍	36
7-1 VOF (Volume Of Fluids) 方法	36
7-2 波前追踪方法 (Front Tracking Method)	38
7-3 Level Set 方法	40
7-4 Phase-Field 方法	41
参考文献	42

第 3 章 当代数值方法简介.....	45
第 8 节 网格生成方法简介	45
8-1 结构网格的生成方法	46
8-2 任意三角元剖分网格的生成问题和有关概念	51
参考文献	58
第 9 节 特征线型差分方法和 Upwind 型格式设计	59
9-1 特征线与 Upwind 概念	59
9-2 一个简例——Upwind 型的蛙跳格式	61
9-3 双曲型守恒律方程组的特征型或 Upwind 型设计	62
参考文献	66
第 10 节 追踪点的应用和追踪方法	67
10-1 一个简单的例子	67
10-2 流体体积函数的 Marker 点追踪	71
参考文献	75
第 11 节 Riemann 问题	76
11-1 Riemann 问题的概念和解法	77
11-2 Roe 的参向量解算子法	83
参考文献	93
第 12 节 高分辨率类方法	94
12-1 时空积分平均形式的格式设计	95
12-2 几种积分平均格式	96
参考文献	103
第 13 节 构造数值流向量的高分辨率方法	105
13-1 TVD 型高分辨率格式	106
13-2 ENO 与 WENO 方法	116
参考文献	123
第 14 节 无结构网格上的有限体积法	125
14-1 一维问题 FVM 方法的讨论	126
14-2 二维问题的 FVM 构造	134

参考文献	146
第 15 节 间断有限元方法	148
15-1 由通常有限元到间断有限元	149
15-2 双曲型守恒律方程的间断 Galerkin 方法	155
15-3 对流-扩散问题的 Galerkin 间断有限元方法	161
15-4 间断 Galerkin 有限元方法的其他应用	164
参考文献	165
第 4 章 运动界面数值追踪和模拟	166
第 16 节 VOF 方法和运动界面的重构技术	166
16-1 VOF 方法	168
16-2 运动界面的初始给定与重构	173
16-3 运动界面重构方法的发展和讨论	179
16-4 几种比较好的界面捕捉方法	187
参考文献	193
第 17 节 等值面 (Level Set) 函数方法	194
17-1 Level Set 方法概述	196
17-2 求解 Level Set 方程	201
17-3 重新初始化方程的求解	204
17-4 物理量的控制方程的求解	206
参考文献	210
第 18 节 数值算例和讨论	212
18-1 ENO 和 WENO 方法的计算实验	213
18-2 间断 Galerkin 有限元方法	215
18-3 无结构网格上的有限体积法	219
18-4 运动界面追踪的一些数值模拟实验	220
18-5 Level Set 方法的几个算例	228
参考文献	232

附 录	235
程序 1 用积分平均格式求解流体体积函数方程	
$C_t + uC_x + vC_y = 0$	235
程序 2 用 FCT-VOF 方法求解流体体积函数方程	
$C_t + uC_x + vC_y = 0$	239
程序 3 用 Hirt & Nichols 的 VOF 方法求解流体	
体积函数方程 $C_t + uC_x + vC_y = 0$	247
程序 4 用 Youngs-VOF 方法求解流体体积函数方程	
$C_t + uC_x + vC_y = 0$	250
程序 5 用 FLAIR 方法求解流体体积函数方程	
$C_t + uC_x + vC_y = 0$	261
程序 6 在矩形网格上用间断 Galerkin 方法求解 Euler	
方程, 用 Level Set 方法追踪激波面, 结合	
Ghost 网格方法求解二维激波问题	274

第 1 章 运动界面问题的数学模型

在这一章里，我们将基本上沿着历史的发展，针对不同的具体问题，考虑到由简单到复杂的过程，向同学们介绍一些比较典型的运动界面问题的数学模型。从最简单的界面输运模型，如活动边界（或者 Stefan 问题）、不可压流 Navier-Stokes 方程（或者浅水波方程自由面问题），特别是运动界面的控制方程，以及基本物理场在不同情况下的运动界面问题，到今后将进行数值模拟的一些典型算例和实验模型。从数学形式上看，可能有各种方程类，在这里我们仅仅讨论其物理背景并给出数学的表达，不进行微分方程理论上的分析和讨论。

第 1 节 经典的活动边界问题（Stefan 问题）

1-1 单相 Stefan 问题

这是一个最简单的运动边界实验模型——融冰问题（Hoffman, 1977）。作为最理想化的模型，可以设想一个周围绝热的冰柱，一头始终有热流输入而导致冰的融化，如图 1-1 所示。记冰水交界点，即运动边界为 $x = s(t)$ ，它由于热传导而不断向

右扩展，设 u 表示其温度。这种理想化模型，过去常常称为活动边界或者 Stefan 问题，又可看作是不定边值问题。

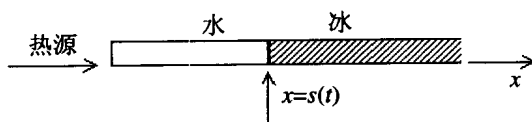


图 1-1 冰水两相活动边界问题

简化的数学模型可以表示为

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} & 0 < x < s(t), 0 < t < T \\ u(x, 0) &= 0 & 0 \leq x \leq s(t) \\ \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{x=0} &= e^t & t > 0 \end{aligned} \quad (1-1)$$

运动边界条件为

$$\begin{aligned} s(0) &= 0, u(s(t), t) = 0, \\ \dot{s} &= \frac{ds}{dt} = -\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=s(t)} \end{aligned} \quad (1-2)$$

问题 (1-1)、(1-2) 有解析解

$$\begin{cases} u(x, t) = e^{t-x} - 1 \\ s(t) = t \end{cases} \quad (1-3)$$

事实上，凡是一维的活动边界模型，只是二维问题的一种近似。最近，Evans 和 King 的论文^[1]比较详细地进行了这方面理论上的分析和研究，特别是给出了非常丰富的参考文献。他们从一般的活动边界或者 Stefan 问题的二维模型（例如硅片的氧化，或者溶剂的扩散等等）出发，通过无量纲化、简化和近似，最后导出一维的活动边界模型

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} & 0 < x < s(t), \quad 0 < t < T \\ u &= \mu \dot{s}(t), \quad \frac{\partial u}{\partial x} = -(u + \lambda) \dot{s}(t) & \text{在 } x = s(t) \\ u(0, t) &= 1 \\ s(0) &= 0\end{aligned} \quad (1-4)$$

其中， λ, μ 为无量纲参数。

1-2 两相 Stefan 问题

这也是冰水的活动边界问题（Bonacina, 1973），但是与前例不同，它认为不同相有相异的热传导系数 k_i 、比热 c_i 和温度 u_i 。其基本数学模型为

$$\begin{aligned}
c_i \frac{\partial u_i}{\partial t} &= k_i \frac{\partial^2 u_i}{\partial x^2} & 0 < t < T^*, 0 < x < s(t) \\
u_i(x, 0) &= u_0 \\
u_1(0, t) &= u^* \\
\frac{\partial u_2}{\partial x} &= 0 & t \rightarrow +\infty
\end{aligned} \tag{1-5}$$

其中 $i = 1, 2$ ，边界条件为（在 $x=s(t)$ 上）

$$\begin{aligned}
u_i(s(t), t) &= 0 \\
\lambda \frac{ds}{dt} &= k_1 \frac{\partial u_1}{\partial x} - k_2 \frac{\partial u_2}{\partial x} \\
s(0) &= 0
\end{aligned} \tag{1-6}$$

其中， $T^* = 0.288$ ， $u^* = 20$ ， $u_0 = 10$ 。准确解是

$$\begin{aligned}
s(t) &= 2\beta\sqrt{K_1 t} \\
u_1 &= u^* \left\{ 1 - \frac{\operatorname{erf}(x/2\sqrt{K_1 t})}{\operatorname{erf}\beta} \right\} \\
u_2 &= u_0 \left\{ 1 - \frac{\operatorname{erfc}(x/2\sqrt{K_2 t})}{\operatorname{erfc}\beta\sqrt{K_1 K_2}} \right\}
\end{aligned} \tag{1-7}$$

其中， $K_i = k_i / c_i$ ， $\beta \approx 0.205428$ 是超越方程

$$\frac{e^{-\beta^2}}{\operatorname{erf}(\beta)} + \frac{K_2}{K_1} \sqrt{\frac{K_1}{K_2}} \frac{u_0 e^{-K_1 \beta^2 / K_2}}{u^* \operatorname{erfc}(\beta \sqrt{K_1 / K_2})} + \frac{\beta \lambda \sqrt{\pi}}{c_1 u^*} = 0 \tag{1-8}$$

的解。

1-3 二维的活动边界问题

论文[1]给出了无量纲形式的二维、两相一般情况下的活动边界问题模型，并且进一步考虑到运动边界的张力（surface tension）和动态冷却效应（Kinetic undercooling effect）。其基本控制方程为

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}(\rho c_i u_i) &= \nabla \cdot (K_i \nabla u_i) \\ X = (x, y) \in D_i, \quad i=1,2, \quad D &= D_1 \cup D_2\end{aligned}\tag{1-9}$$

其中， $i=1$ 表示流体相， $i=2$ 表示固体相。 $u_i(X, t)$, K_i 和 c_i 分别表示不同相中的温度、热传导系数和比热比。 ρ 是不同相所具有的相同的密度。

运动相边界表示为

$$S(X, t) = 0\tag{1-10}$$

在这种活动边界上的条件称为 Stefan 条件：

$$\left[K_i \frac{\partial u_i}{\partial n} \right]_{i=2}^{i=1} = -\rho v_n ([c_i (u_i - u_m)]_{i=2}^{i=1} + L)\tag{1-11}$$

此外，活动界面上的温度连续条件，即它的两侧不同相温度应当

相等，且要考虑到动态冷却和边界面的应力效应，从而又有

$$u_1 = u_2 = u_m + \sigma \kappa + \beta v_n \quad (1-12)$$

其中， n 为边界曲面由流体相到固相的单位法向， v_n 为相边界面在该法向上的运动速度， u_m 称为平衡熔化温度（equilibrium melting temperature）， σ, κ 和 β 分别是张力系数、平均曲率和动态冷却系数。 L 是在平均温度下的单位质量的潜热。

第 2 节 浅水波方程和自由面流模型

作为二维问题的一种近似，采用理想化的一维浅水波方程，也可以对溃坝，波形在斜坡上爬升、变形，以至破碎进行启发性的数值模拟，甚至可以对因水底坡面障碍物所导致波形的扰动等现象进行计算机数值实验。这类问题通常称为自由面问题。如图 2-1 所示，表现了底坡有倾斜的、理想化的一维溃坝模型。

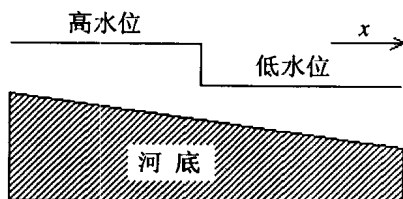


图 2-1 一维溃坝问题