DOI: 10.11883/1001-1455(2017)01-0114-06

多介质流体力学计算的谱体积方法*

刘 娜[1,2,3],陈艺冰[1,3]

(1.北京应用物理与计算数学研究所,北京 100088;
2.中国工程物理研究院高性能数值模拟软件中心,北京 100088;
3.北京应用物理与计算数学研究所计算物理实验室,北京 100088)

摘要:针对高维及多物理耦合计算耗费大等困难,设计适合多介质流动模拟的模板紧致、易于并行、高阶精度、计算耗费小的谱体积方法。该方法是求解双曲型守恒率谱体积方法的直接推广,针对多介质流动物质界面捕捉的困难,利用拟守恒格式的思想避免物质界面处的非物理振荡。数值模拟结果表明,本方法具有高阶精度、高分辨率,且节约计算量,并且可以有效避免物质界面处非物理振荡。

关键词:流体力学;谱体积方法;高精度;刚性气体;多介质;模板紧致

中图分类号:O357.4 **国标学科代码**:1302511 **文献标志码**:A

多介质流体力学的模型可以用扩展欧拉方程组描述。早期,使用守恒格式直接求解,但在接触间断(物质界面)附近,会产生非物理的压力和速度振荡。随后,很多学者对此进行分析,并提出各种补救措施[1-2],其中 R. Abgrall 等提出的拟守恒型格式,由于其简单、健壮得到了广泛应用。此后,K. M. Shyue[3-4]、Y. B. Chen 等[5]进一步发展了这个方法。这些工作通常采用 MUSCL 限制器,精度不超过二阶。

当前,实际工程问题中对精细化设计提出越来越高的要求,不少更高阶(高于 2 阶)精度的格式被应用于求解多介质问题。其中,E. Johnsen 等[6]将 WENO 格式推广于求解扩展欧拉方程组,取得成功。他的算法极大提高了对物质界面的分辨率,但 WENO 格式进行重构时,需要利用目标单元及其周围单元的信息,随着格式阶数的增大,需要不断扩展模板,在高维情形复杂度将急剧增加。J. Zhu 等[7]采用 DG 格式来求解这个问题。与 WENO 相比,DG 格式仅采用局部模板即可获得高精度。实际上,DG 格式是近年来广受关注的高精度紧致格式的典型代表之一。除了 DG 方法之外,谱体积(SV)格式[8-9]也是一类成功的高精度紧致格式。它是谱方法和有限体积方法的结合体,其主要思想是根据细分的控制体的单元均值,重构出谱体积元中的近似解。本质上,DG 方法和 SV 方法都是采用目标单元内部信息来获得网格单元内解的逼近,因此模板都较为紧致,且在并行计算时不需要通信周围单元的信息,是一种高并行度的格式。与 DG 方法相比,SV 方法的一个优点在于节省了表面积分和体积分的计算,并且根据 Z. J. Wang[8]的分析,SV 方法对 CFL 数的限制也更低。

本文中,针对高维及多物理耦合计算耗费大等困难,设计适合多介质流动模拟的谱体积方法。

1 控制方程

非定常可压缩流体可以用欧拉方程来描述,以一维为例可以记为:$\partial \boldsymbol{W}/\partial t+\partial \boldsymbol{F}(\boldsymbol{W})/\partial x=\boldsymbol{0}$,其中 $\boldsymbol{W}=(\rho,\rho u,\rho E)^{\mathrm{T}}$,$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{W})=(\rho u,\rho u^2+p,(\rho E+p)u)^{\mathrm{T}}$。刚性气体状态方程为 $p=(\gamma-1)\rho e-\gamma p_\infty$,其中 γ 为比热比,p_∞ 为参考压力。由于流体流动时状态量 γ 随着流动保持不变,因此满足[10]:$\partial\gamma/\partial t+u\partial\gamma/\partial x=0$。定义质量比分 $Y=\rho_1/(\rho_1+\rho_2)$,建立 γ 与 Y 的关系:$\dfrac{1}{\gamma-1}=\dfrac{Y}{\gamma_1-1}+\dfrac{1-Y}{\gamma_2-1}$,则质量比分同样满足:

* **收稿日期**:2015-05-11;**修回日期**:2015-09-20
基金项目:国家自然科学基金项目(11101047,11501043,11671050,91430218,U1630247);
中国工程物理研究院科学技术发展基金项目(2013A0202011)
第一作者:刘 娜(1986—),女,博士,助理研究员,liu_na@iapcm.ac.cn。

$$\frac{\partial Y}{\partial t}+u\frac{\partial Y}{\partial x}=0 \tag{1}$$

写成守恒律形式$\partial(\rho Y)/\partial t+\partial(\rho uY)/\partial x=0$。这相当于在 Euler 方程的基础上增加了一个新的守恒量及其守恒律方程，得到了一个完整的多介质 Euler 方程组，方便起见，仍记为：

$$\frac{\partial \boldsymbol{W}}{\partial t}+\frac{\partial \boldsymbol{F}(\boldsymbol{W})}{\partial x}=\boldsymbol{0} \tag{2}$$

式中：$\boldsymbol{W}=(\rho,\rho u,\rho E,\rho Y)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{W})=(\rho u,\rho u^2+p,(\rho E+p)u,\rho uY)^{\mathrm{T}}$。

2　守恒谱体积方法

直接将谱体积方法推广应用于多介质 Euler 方程组(2)。下面给出格式设计的基本框架：将计算区域 Ω 划分为 N 个子区间$\{S_i=[x_{i-1/2},x_{i+1/2}]\subset\Omega,i\in Z\}$，每个 S_i 称为谱体积元，$h_i=x_{i+1/2}-x_{i-1/2}$表示其区间长度。假设要设计一个 k 阶精度格式，则将每个谱体积元 S_i 进一步分化成 k 个控制体，即 $C_{i,j}=(x_{i,j-1/2},x_{i,j+1/2})$，$j=1,\cdots,k$。在每个控制体上定义控制体单元平均值 $\overline{W}_{i,j}^n=\frac{1}{h_{i,j}}\int_{C_{i,j}}W(x,t_n)\mathrm{d}x$，$j=1,\cdots,k$。将控制方程(2)在 $C_{i,j}$ 上积分，可以得到如下半离散格式：

$$\frac{\mathrm{d}\overline{W}_{i,j}}{\mathrm{d}t}+\frac{1}{h_{i,j}}(\hat{F}_{i,j+1/2}-\hat{F}_{i,j-1/2})=0 \tag{3}$$

要完成 k 阶谱体积格式，还需要 3 个步骤。

步骤 1：重构。利用给定的 t_n 时刻的控制体单元平均值进行重构。在每个谱体积单元 S_i 内部，由 k 个控制体的单元平均值，重构出在谱体积元 S_i 内的一个至多 $k-1$ 次多项式 $W_i^n(x)$。这样得到的重构多项式可能会引起数值振荡，为了避免高阶重构带来的数值振荡，对重构多项式利用基于原始变量的修正 TVB minmod 斜率限制器的思想进行限制。详细过程可以参见文献[8]。经过限制，在整个计算区域的重构函数具有如下性质：(1)在谱体积单元内部不需要限制的控制体界面处，重构多项式函数是连续的；(2)在谱体积单元界面处或谱体积单元内部限制器起作用的控制体单元界面处，重构多项式函数是间断的。

步骤 2：计算数值通量。根据重构多项式的性质，在谱体积单元内部状态连续的控制体单元界面处，直接使用连续的数值通量 $\hat{F}_{i,j+1/2}=F(W_{i,j+1/2})$，而在谱体积单元界面处以及谱体积单元内部经过限制后的控制体单元界面处，由于两侧的状态值不同，使用间断数值通量 $\hat{F}_{i,j+1/2}=F(W_{i,j+1/2}^{n-(\mathrm{mod})},W_{i,j+1/2}^{n+(\mathrm{mod})})$。常用的数值通量计算方法，如 Lax-Friedrichs、HLLC、Roe、BGK 通量等都可以使用，本文中选择最简便的 Lax-Friedrichs 数值通量。

步骤 3：时间方向离散。时间方向可以采用 4 阶 Runge-Kutta 方法离散。

3　稳定性分析

根据第 2 节谱体积方法在多介质守恒扩展欧拉方程组上的直接推广计算多介质问题，会产生物质界面处压力、速度的非物理振荡。在第 5.2 节将显示一维多介质运动界面问题的计算结果。R. Abgrall 等[1-2]指出，这些非物理振荡是由于对组分方程的守恒离散造成的。下面以 Lax-Friedrichs 通量为例进行分析，为了简便起见，时间方向考虑 Euler 方法离散，则质量、动量、能量方程的离散可以表示为：

$$\bar{\rho}_{i,j}^{n+1}=\bar{\rho}_{i,j}^n-\frac{\Delta t}{h}\left(\frac{1}{2}\Delta_j^0\rho u-\frac{\alpha}{2}(\Delta_j^+\rho-\Delta_j^-\rho)\right) \tag{4}$$

$$(\bar{\rho}\bar{u})_{i,j}^{n+1}=(\bar{\rho}\bar{u})_{i,j}^n-\frac{\Delta t}{h}\left(\frac{1}{2}\Delta_j^0(\rho u^2+p)-\frac{\alpha}{2}(\Delta_j^+\rho u-\Delta_j^-\rho u)\right) \tag{5}$$

$$(\bar{\rho}\bar{E})_{i,j}^{n+1}=(\bar{\rho}\bar{E})_{i,j}^n-\frac{\Delta t}{h}\left(\frac{1}{2}\Delta_j^0(\rho Eu+pu)-\frac{\alpha}{2}(\Delta_j^+\rho E-\Delta_j^-\rho E)\right) \tag{6}$$

式中：$\Delta_j^0\rho=\bar{\rho}_{i,j+1}^n-\bar{\rho}_{i,j-1}^n$，$\Delta_j^+\rho=\bar{\rho}_{i,j+1}^n-\bar{\rho}_{i,j}^n$，$\Delta_j^-\rho=\bar{\rho}_{i,j}^n-\bar{\rho}_{i,j-1}^n$。

若 n 时刻速度 $u=u_0$ 和压力 $p=p_0$ 为常数，则根据(5)结合(4)，可得：$(\bar{\rho}\bar{u})_{i,j}^{n+1}=\bar{\rho}_{i,j}^{n+1}u_0$，即在 $n+1$ 时刻速度可以保持常数：$\bar{u}_{i,j}^{n+1}=u_0$。进一步，将状态方程代入(6)，则 $n+1$ 时刻满足：$\dfrac{p_{i,j}^{n+1}}{(\gamma-1)_{i,j}^{n+1}}=\dfrac{p_{i,j}^{n}}{(\gamma-1)_{i,j}^{n}}-\dfrac{\Delta t}{h}\left(\dfrac{1}{2}\Delta_j^0\dfrac{pu}{\gamma-1}-\dfrac{\alpha}{2}\left(\Delta_j^+\dfrac{p}{\gamma-1}-\Delta_j^-\dfrac{p}{\gamma-1}\right)\right)$。

若压力在 $n+1$ 时刻也保持常数，则需要满足：$\dfrac{1}{(\gamma-1)_{i,j}^{n+1}}=\dfrac{1}{(\gamma-1)_{i,j}^{n}}-\dfrac{\Delta t}{h}\left(\dfrac{1}{2}\Delta_j^0\dfrac{u}{\gamma-1}-\dfrac{\alpha}{2}\left(\Delta_j^+\dfrac{1}{\gamma-1}-\Delta_j^-\dfrac{1}{\gamma-1}\right)\right)$，上式等价于：

$$Y_{i,j}^{n+1}=Y_{i,j}^{n}-\frac{\Delta t}{h}\left(\frac{1}{2}\Delta_j^0 Yu-\frac{\alpha}{2}(\Delta_j^+Y-\Delta_j^-Y)\right) \tag{7}$$

式(7)可以看做偏微分方程 $\partial Y/\partial t+\partial(uY)/\partial x=0$ 的离散。显然，这与质量比分满足的方程(1)不同，即第 2 节中的谱体积格式无法满足压力无振荡的必要条件(7)，并因此造成了物质界面处压力、速度的非物理振荡。

4 拟守恒谱体积方法

根据第 3 节的稳定性分析，对第 2 节中的数值格式做一些修正。将质量比分方程(1)写成如下形式 $\partial Y/\partial t+\partial f/\partial x-Y\partial g/\partial x=0$，其中 $f=uY$，$g=u$。质量比分方程的半离散格式修正为：

$$\frac{\mathrm{d}\bar{Y}_{i,j}}{\mathrm{d}t}+\frac{1}{h_{i,j}}(\hat{f}_{i,j+1/2}-\hat{f}_{i,j-1/2})-\frac{\bar{Y}_{i,j}^n}{h_{i,j}}(\hat{g}_{i,j+1/2}-\hat{g}_{i,j-1/2})=0 \tag{8}$$

在物质界面处，速度 u 保持常数，则离散格式(8)满足压力无振荡的必要条件(7)，且离散格式与质量比分方程(1)相容。

5 数值模拟

数值模拟用以检验格式的精度和性能，计算中一维算例 CFL 数取 1.0，二维取 0.5。

5.1 精度测试

在区域[0,2]上有两种介质组成的正弦波：

$$\rho(x,0)=1+0.2\sin(\pi x),\quad u(x,0)=0.7,\quad p(x,0)=1,\quad \gamma(x,0)=\begin{cases}1.4 & 0\leqslant x\leqslant 1\\ 1.9 & 1<x\leqslant 2\end{cases}$$

周期边界条件。表 1 中给出 $t=1.0$ 时各阶格式精度测试结果，结果显示 2～5 阶格式都可以达到相应收敛率。

表 1 格式的数值精度

Table 1 Numerical accuracy of present schemes

N	L_{err}^1	order	L_{err}^1	order	L_{err}^1	order	L_{err}^1	order
	$k=2$		$k=3$		$k=4$		$k=4$	
10	4.80×10^{-3}	—	3.91×10^{-4}	—	7.22×10^{-6}	—	4.69×10^{-7}	—
20	1.17×10^{-4}	2.04	6.77×10^{-5}	2.53	4.34×10^{-7}	4.06	1.93×10^{-8}	4.60
40	2.93×10^{-5}	2.00	9.64×10^{-6}	2.81	2.47×10^{-8}	4.14	6.79×10^{-10}	4.83
80	7.34×10^{-5}	2.00	1.26×10^{-6}	2.94	1.56×10^{-9}	3.98	2.21×10^{-11}	4.94
160	1.84×10^{-5}	2.00	1.59×10^{-7}	2.99	9.77×10^{-11}	4.00	6.85×10^{-13}	5.01

5.2 一维多介质运动界面问题

在区域[0,1]上有两种介质流体，以相同的速度匀速向右移动，界面匀速向右移动，初值条件为：

$$(\rho,u,p,\gamma)=\begin{cases}(1,1,1,1.6) & 0\leqslant x\leqslant 0.5\\ (0.1,1,1,1.4) & 0.5<x\leqslant 1\end{cases}$$

图 1 显示了采用守恒谱体积格式 100 个谱体积单元在 $t=0.1$ 时的压力和速度，可以看出，在物质界面处出现速度与压力的数值振荡，与第 3 节中的分析结果一致。为方便看清图像，图中只显示了奇数阶结果。图 2 显示了格式修正后的计算结果，结果显示，此时在物质界面处不会产生速度和压力的数值振荡，物质界面附近密度和比热比的局部放大图显示高阶格式具有更高的分辨率。

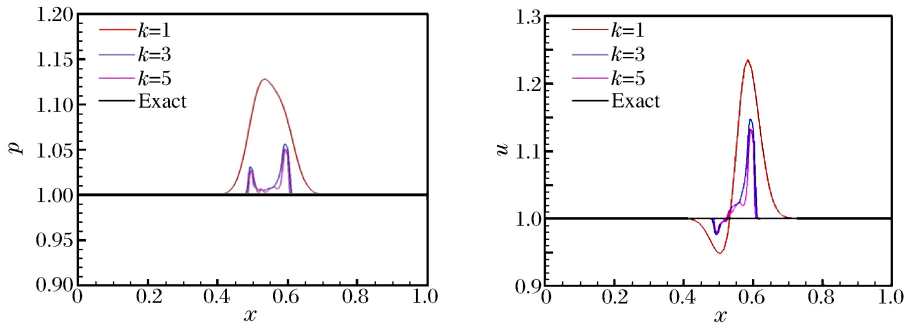

图 1 守恒谱体积格式的一维多介质运动界面问题

Fig. 1 One-dimensional moving interface problem for conservative spectral volume scheme

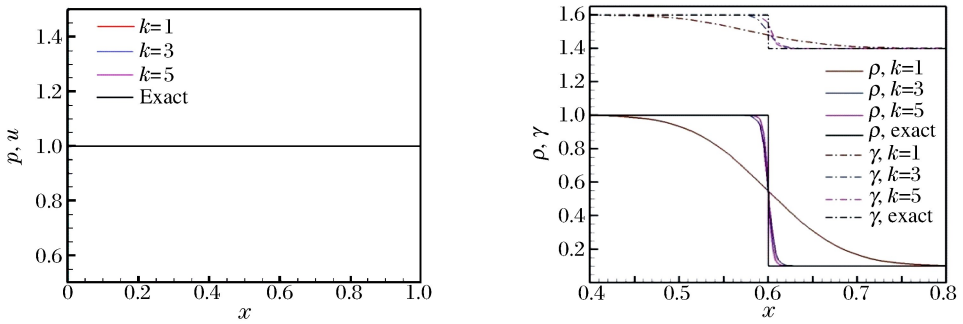

图 2 拟守恒谱体积格式的一维多介质运动界面问题

Fig. 2 One-dimensional moving interface problem for quasi-conservative spectral volume scheme

5.3 高压力比气液激波管问题

在区域[−0.2,1]上求解初值问题：

$$(\rho,u,p,\gamma)=\begin{cases}(10^3,0,10^9,4.4,6\times10^8) & -0.2\leqslant x\leqslant 0.5\\ (50,0,10^5,1.4,0) & 0.5<x\leqslant 1\end{cases}$$

图 3 显式了 $t=0.000\ 2$ 时刻使用 720 个谱体积单元 1、3、5 阶拟守恒谱体积格式计算的结果，结果显示，此时在物质界面处不会产生速度和压力的数值振荡。图 4 显示了密度及其在物质界面和激波附近的局部放大图，结果表明高阶格式具有更高分辨率。

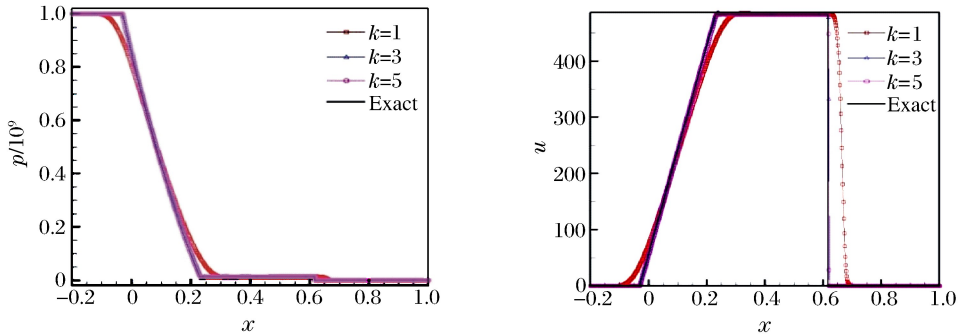

图 3 拟守恒谱体积格式的高压力比气液激波管问题

Fig. 3 High pressure ratio gas-liquid shock tube problem for quasi-conservative spectral volume scheme

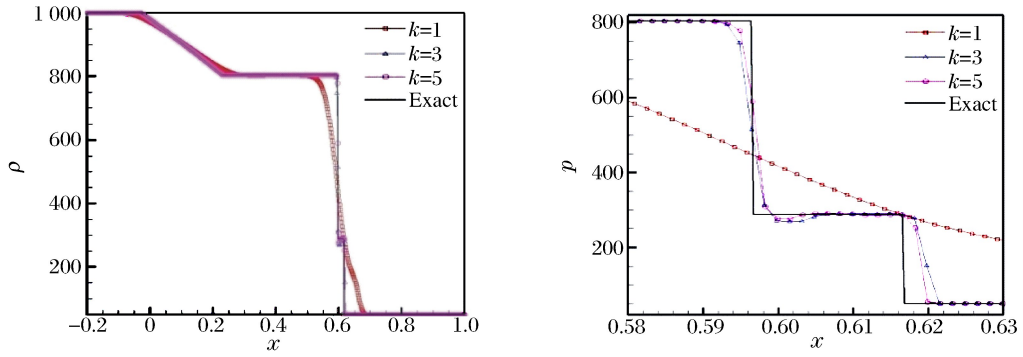

图 4 拟守恒谱体积格式的高压力比气液激波管问题

Fig. 4 High pressure ratio gas-liquid shock tube problem for quasi-conservative spectral volume scheme

5.4 三点问题

初值条件为：

$$(\rho,u,p,\gamma)=\begin{cases}(2,0,0,1,1.4) & 0\leqslant x\leqslant 1,0\leqslant y\leqslant 1\\(0.1,0,0,0.1,1.4) & 1\leqslant x\leqslant 3,0.5\leqslant y\leqslant 1\\(1,0,0,0.1,1.6) & 1\leqslant x\leqslant 3,0\leqslant y\leqslant 0.5\end{cases}$$

初始空气(轻介质)位于水(重介质)上方，两种介质流体保持静止，静止高密度高压气体位于其右侧分别与低压空气和水产生作用，分别产生向左运动的稀疏波、向右移动的激波，以及推动物质界面向右移动。由于右侧上方的空气较轻，因此右侧上方的激波和物质界面向右移动的速度更快，于是在 3 种状态的流体的交汇点产生漩涡。形成漩涡后，上层空气与下层水的交界面发生弯曲，并与激波发生作用，形成马赫杆。图 5 显示了 $t=1.0$ 时使用 600×200 个网格 2～5 阶格式计算的结果，可以看到，各阶格式都能计算出此时基本的波结构，并且随着格式精度的增加能够捕捉到更精细的结构。

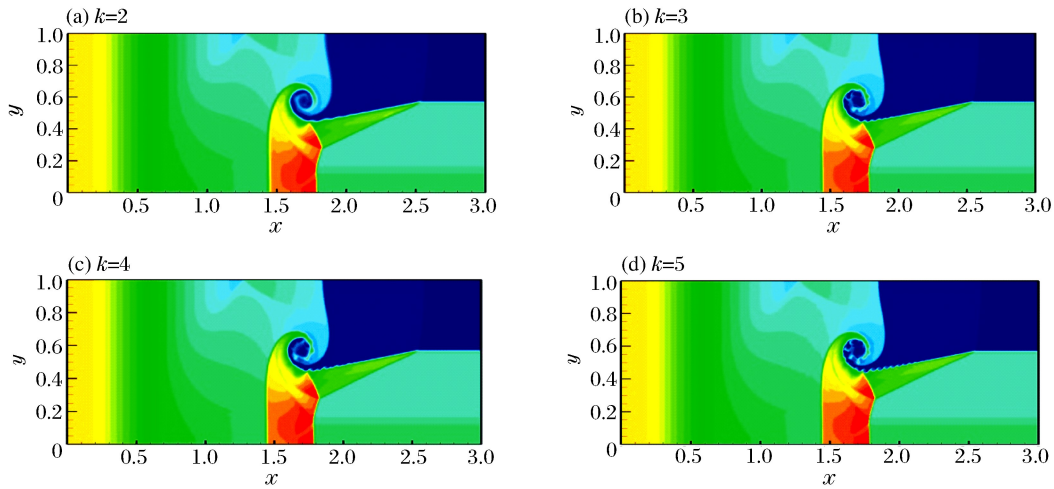

图 5 拟守恒谱体积格式的三点问题密度等值线图

Fig. 5 Density contours of triple point problem for quasi-conservative spectral volume scheme

6 结 论

以多介质拟守恒格式为基础，通过高精度谱体积重构，构造了一类求解多介质问题的高阶精度拟守恒谱体积格式，有效提高了求解多介质问题的精度，并且继承谱体积格式模板紧致、易于并行等优点。数值结果表明，新格式求解多介质问题具有高阶精度，且模板紧致，并且不会在物质界面处产生非物理振荡。

参考文献:

[1] Abgrall R. How to prevent pressure oscillations in multicomponent flow calculation: A quasi conservative approach [J]. Journal of Computational Physics,1996,125(1):150-160.

[2] Abgrall R, Karni S. Computations of compressible multifluids[J]. Journal of Computational Physics, 2001,169(2):594-623.

[3] Shyue K M. An effcient shock-capturing algorithm for compressible multicomponent problems[J]. Journal of Computational Physics, 1998,142(1):208-242.

[4] Shyue K M. A fluid-mixture type algorithm for compressible multicomponent flow with Mie-Gruneisen equation of state[J]. Journal of Computational Physics, 2001,171(2):678-707.

[5] Chen Y B, Jiang S. A non-oscillatory kinetic scheme for multicomponent flows with the equation of state for a stiffned gas[J]. Journal of Computational Mathematics, 2011,29(6):661-683.

[6] Johnsen E, Colonius T. Implementation of WENO schemes in compressible multicomponent flow problems[J]. Journal of Computational Physics, 2006,219(2):715-732.

[7] Zhu J, Qiu J X, Liu T G, et al. RKDG methods with WENO type limiters and conservative interfacial procedure for one-dimensional compressible multi-medium flow simulations[J]. Applied Numerical Mathematics, 2011,61(4):554-580.

[8] Wang Z J. Spectral (finite) volume method for conservation laws on unstructured grids: Basic formulation[J]. Journal of Computational Physics, 2002,178(1):210-251.

[9] Wang Z J, Liu Y. Spectral (finite) volume method for conservation laws on unstructured grids Ⅲ: One dimensional systems and partition optimization[J]. Journal of Scientific Computing, 2004,20(1):137-157.

[10] Karni S. Multicomponent flow calculations by a consistent primitive algorithm[J]. Journal of Computational Physics, 1994,112(1):31-43.

High order spectral volume method for multi-component flows

Liu Na [1,2,3], Chen Yibing[1,3]

(1. *Institute of Applied Physics and Computational Mathematics*, *Beijing* 100088, *China*;
2. *CAEP Software Center for High Performance Numerical Simulation*, *Beijing* 100088, *China*;
3. *Laboratory of Computational Physics*, *Institute of Applied Physics and Computational Mathematics*, *Beijing* 100088, *China*)

Abstract: Numerical simulation of multi-material flows has been an important issues in CFD, and most CFD production codes used for multi-material flow simulation is of either first or second order accuracy, too inefficient and costly with its grid refinement for high accuracy required problems. In this paper, a high-order, efficient, compact method, called the spectral volume method, was developed for the simulation of the multi-material flow as an extension of the spectral volume method for the conservation laws. It has been pointed out that the conservative spectral volume method for the multi-material flow will cause oscillation, and the reason for this has been analyzed. So the idea of quasi-conservative scheme was borrowed to prevent the spurious oscillations in the vicinity of a material contact discontinuity. Several numerical experiments proved that there is no oscillation near the material interface and the result also demonstrates the accuracy, the efficiency and the high performance of the scheme for the multi-material flow simulation.

Key words: fluid mechanics; spectral volume method; high order; stiffened gas; multi-component flows; compact stencil

(责任编辑　丁　峰)