

DOI: 10.7511/jslx20230521002

密度基两相流求解方法的显式大时间步格式研究

黄懿*, 于海东, 尤天庆

(北京宇航系统工程研究所, 北京 100076)

摘要: 两相流的六方程模型是双曲非守恒型系统, 并具有非平衡源项。基于密度的方程求解方法则包含了齐次的双曲型方程求解以及非平衡源项的松弛过程。在齐次方程的求解中, Godunov 型格式下的时间步长受到 CFL 数小于 1 的限制, 计算效率不高。显式大时间步 (LTS) 格式是双曲守恒型方程的求解中突破 CFL 数限制的重要方法之一。在线性波的假设下, 本文将通量差分裂 (FDS) 形式的 LTS 格式推广到了非守恒型的两相流六方程模型的求解中, 提出了基于 HLLC 型 Riemann 求解器的 LTS 格式 (LTS-HLLC)。研究表明, 在两相明显分离的区域, LTS-HLLC 格式下增大 CFL 数可以减小数值粘性, 提升了对激波等间断的分辨率也更易产生振荡, 这与双曲守恒型方程中 LTS 格式的效果相同。但是在两相混合的区域, 增大 CFL 数会加大松弛过程的耗散, 使得对间断的分辨率反而降低。采用 LTS-HLLC 格式提高 CFL 数可以有效降低计算消耗的 CPU 时间, 提高计算效率。

关键词: 两相流; 显式大时间步格式; 非守恒型方程; 松弛方法; 叠波法

中图分类号: O359⁺.1

文献标志码: 1087

文章编号: 1007-4708(2024)06-1087-10

1 引言

两相流动广泛存在于自然界与工程中, 如发动机中的燃油和空气的混合、跨介质运动、核工程中的爆燃与爆轰 (DDT) 以及高压水流切割等。在不可压缩或者弱可压缩流动下, 基于压力的两相流求解方法得到了广泛运用和发展^[1]。另一方面, Baer-Nunziato 模型^[2]是研究可压缩两相流的常用模型, 模型假设了两相均具有可压缩性, 并且处于力学、热力学和化学的非平衡状态。Baer-Nunziato 模型包含了分相的质量、动量和能量的守恒方程, 以及相体积分方程, 也称作七方程模型。Kapila 等^[3]在速度和压力平衡 (力学平衡) 下, 将七方程模型简化为五方程模型。但是五方程模型在数值求解上存在很多困难, 比如相体积分数的保正性、非单调的声速等, 在激波等间断附近容易产生数值振荡^[4]。因此, Saurel 等^[4]减弱了力学平衡的条件, 考虑仅有速度平衡而压力不平衡的模型, 即六方程模型。六方程模型克服了五方程模型在数值求解方面的一些问题, 是一种较为稳定的计算方法, 目

前得到较为广泛的研究与发展^[4-7]。

七方程模型及其简化模型的主要特点是双曲型、非守恒性和非平衡性。由于双曲型方程的特点, 采用 Godunov 型格式利用精确或近似 Riemann 求解器进行求解是主要方法^[4-12]。但是, 非守恒项的存在使得 Riemann 问题的求解和通量的构建与双曲守恒型方程 (Euler 方程) 不同^[4-12]。采用基于路径守恒 (Path-conservative) 下的广义 Rankine-Hugoniot 关系是求解非守恒型方程 Riemann 问题的一般思路^[8, 10-12]。但是基于路径守恒形式构造的 Riemann 解在六方程和五方程下形式复杂、计算量更大^[6, 10, 12], 因此一些方法开始寻求不采用路径守恒的形式而直接构造 Riemann 求解器^[5, 9]。De Lorenzo 等^[6]在六方程模型下比较了路径守恒形式和非路径守恒形式构造的 Riemann 求解器, 发现在两相明显分离的区域, 两种形式下的 Riemann 求解器得到的结果几乎完全相同, 因为在单相区域内非守恒项并不起作用; 而在两相混合物区域并且具有强激波间断的情况下, 其结果才有不同^[9]。另外, 对于非平衡源项的求解过程则主要求解了两相间非平衡的压力、温度、化学势趋向

收稿日期: 2023-05-21; 修改稿收到日期: 2023-08-07.

基金项目: 国家自然科学基金联合基金项目 (U20B2004) 资助.

作者简介: 黄懿* (1994-), 男, 博士, 工程师 (E-mail: hyyicixin@163.com).

引用本文: 黄懿, 于海东, 尤天庆. 密度基两相流求解方法的显式大时间步格式研究 [J]. 计算力学学报, 2024, 41(6): 1087-1096.

HUANG Yi, YU Hai-dong, YOU Tian-qing. An investigation on the explicit large-time step scheme in the density-based two-phase flow solver [J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2024, 41(6): 1087-1096.

或达到平衡的过程,反映了两相间由于压力差产生的做功、温度差产生的传热、化学势差产生的相变或者传质过程,这一过程也称为松弛过程^[4,5,7]。

在 Godunov 型格式中,计算稳定性要求时间步长受到 CFL 数($u\Delta t/\Delta x$)小于 1 的限制,其中的速度尺度(u)与声速相关,因而六方程模型的求解步长通常较小,计算效率不高。在双曲守恒型方程(Euler 方程)的求解中,采用显式大时间步格式(Large time step-LTS)是一种突破 CFL 数限制,提高计算效率的途径^[13-21]。经典显式时间推进的 CFL 数小于 1 的限制主要原因是单元中心值的变化仅由该单元界面上产生的波决定。LeVeque^[13,14]针对标量守恒型方程提出了 LTS-Godunov 型格式,假设所有界面上不同波系之间的相互作用是线性的,单元中心值的变化则由所有穿过该单元的波产生的增量求和而不仅仅来自于该单元界面上的波,这一方法也称为叠波法。基于叠波法的思路,Lindqvist 等^[16]通过修正方程定量给出了 LTS 格式的数值粘性的大小,结果表明 LTS 格式可以减小数值粘性,提升格式对间断的分辨率。Pregbeg 等^[17]给出了守恒型方程下的 HLL 和 HLLC 型近似 Riemann 求解器下的 LTS 格式。和经典时间推进方法相比,显式大时间步方法具有计算效率高,对间断分辨率更好的特点;和隐式时间推进相比,由于依然是局部推进,显式大时间步方法的并行拓展性更好^[15]。因此,LTS 格式的运用也引起研究者的兴趣,如应用在三维 Euler 方程^[15]以及浅水波方程中^[18,19]。在两相流方面,Lindqvist 等^[20]利用 LTS-Roe 格式求解七方程模型简化的三方程模型,但三方程模型本质上是守恒型方程。Pregbeg 等^[21]也运用 LTS-Roe 格式求解了等熵且压力平衡下的四方程模型,但从方程求解上来看,该四方程模型没有包含非平衡源项的松弛过程。到目前为止,LTS 格式在六方程模型求解中还没有相关运用。

本文将讨论显式大时间步格式在密度基两相流六方程模型的求解中的运用。研究基于 HLLC 型近似 Riemann 求解器的 LTS 格式在此非守恒型方程的求解框架下,对计算结果以及计算效率的影响,并讨论 LTS 格式与非平衡源项的松弛过程之间的影响。

2 数值方法

2.1 两相流的六方程模型

两相流的六方程模型是七方程模型下仅有速

度平衡的方程(以一维为例)。

$$\partial_t \mathbf{Q} + \partial_x \mathbf{F} + \mathbf{B}(\mathbf{Q})\partial_x \mathbf{Q} = \mathbf{S}_p + \mathbf{S}_T + \mathbf{S}_g \quad (1)$$

其中守恒变量

$$\mathbf{Q} = [\alpha_1, \alpha_1 \rho_1, \alpha_2 \rho_2, \rho u, \alpha_1 \rho_1 E_1, \alpha_2 \rho_2 E_2]^T \quad (2)$$

式中下标 1,2 分别代表相 1 和相 2,方程组包含了相体积分数 α_k 、分相质量($\alpha_k \rho_k$)、混合物动量 ρu 以及分相总能($\alpha_k \rho_k E_k$)的方程,共计六个方程,因此称作六方程模型。守恒型通量 $\mathbf{F}(\mathbf{Q}) = [0, \alpha_1 \rho_1 u, \alpha_2 \rho_2 u, \rho u^2 + p, \alpha_1 \rho_1 H_1 u, \alpha_2 \rho_2 H_2 u]^T$,其中 $\alpha_k \rho_k H_k = \alpha_k \rho_k E_k + \alpha_k p_k$ 为总焓,混合物压力 $p = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2$,非守恒项 $\mathbf{B}(\mathbf{Q})\partial_x \mathbf{Q} = [u \partial_x \alpha_1, 0, 0, 0, H_V, -H_V]^T$

$$\text{其中 } H_V = -u[Y_2 \partial_x(\alpha_1 p_1) - Y_1 \partial_x(\alpha_2 p_2)] \quad (3)$$

式中 $Y_k = \alpha_k \rho_k / \rho$ 是质量分数,此非守恒项无法写成如 $\partial_x \mathbf{G}$ 的守恒形式。非平衡源项分别代表了压力不平衡($p_1 \neq p_2$)、温度不平衡($T_1 \neq T_2$)、化学势不平衡($g_1 \neq g_2$)引起的源项,描述了在两相界面处相间作用:

$$\mathbf{S}_p = \mu(p_1 - p_2)[1, 0, 0, 0, -p_1, p_1]^T$$

$$\mathbf{S}_T = \theta(T_1 - T_2)[0, 0, 0, 0, -1, 1]^T \quad (4)$$

$$\mathbf{S}_g = \nu(g_1 - g_2)[0, 1, -1, 0, \varepsilon_1, -\varepsilon_1]^T$$

其中 (μ, θ, ν) 称为松弛系数,代表了相互作用的强度或者松弛过程的快慢。下标 I 代表界面上的状态量,其中 $\varepsilon_I = g_I + 0.5u^2$ 。在刚性气体状态方程的假设下,上述方程可以封闭表示为

$$p_k = (\gamma_k - 1)\rho_k e_k - \gamma_k \pi_k - (\gamma_k - 1)\rho_k \eta_k$$

$$T_k = \frac{p_k + \pi_k}{\rho_k C_{v,k}(\gamma_k - 1)}$$

$$s_k = C_{v,k} \ln \frac{T_k^{\gamma_k}}{(p_k + \pi_k)^{\gamma_k - 1}} + \eta'_k$$

(5)

其中 s_k 是分相的熵,化学势 $g_k = h_k - T_k s_k$, h_k 和 e_k 分别代表焓和内能, $k=1,2$ 分别代表了相 1 和相 2。 π, η 和 η' 均是常数,分别代表了参考压强,参考内能和参考熵。 C_v 是定容比热, $\gamma = C_p / C_v$ 为定压比热和定容比热的比。刚性气体的声速由 $\rho_k c_k^2 = \gamma_k(p_k + \pi_k)$ 决定。

六方程模型具有非守恒性和非平衡性,采用算子分裂法将其求解分成两个步骤,分别是齐次方程的求解以及非平衡源项的松弛过程。齐次方程为

$$\partial_t \mathbf{Q} + \partial_x \mathbf{F} + \mathbf{B}(\mathbf{Q})\partial_x \mathbf{Q} = 0 \quad (6)$$

其拟线性系数 $\mathbf{A}(\mathbf{Q}) = \partial \mathbf{F} / \partial \mathbf{Q} + \mathbf{B}(\mathbf{Q})$,其特征值为 $\lambda_1 = u - c_p, \lambda_2 = u + c_p, \lambda_{3,4,5,6} = u$,均是实数,其中

声速 $c_p^2 = Y_1 c_1^2 + Y_2 c_2^2$, 即六方程模型为双曲型方程。本文采用文献[5]提出的 HLLC 型近似 Riemann 求解器, 可以较好地描述两相流中的各类波系、接触间断以及相界面^[5,7]。对于 Riemann 问题

$$\partial_t \mathbf{Q} + \partial_x \mathbf{F} + \mathbf{B}(\mathbf{Q}) \partial_x \mathbf{Q} = 0$$

$$\mathbf{Q}(x, t=0) = \begin{cases} \mathbf{Q}_L & (x < 0) \\ \mathbf{Q}_R & (x > 0) \end{cases} \quad (7)$$

其解假设由左右两道激波和中间的接触间断, 分成了四个部分, 依次为 $\mathbf{Q}_L, \mathbf{Q}_L^*, \mathbf{Q}_R^*$ 和 \mathbf{Q}_R , L 和 R 分别代表间断的左侧和右侧, 上标 * 则代表中间状态。左侧和右侧两道激波的波速分别假设为

$$S_L = \min\{u_L - c_L, u_R - c_R\}$$

$$S_R = \max\{u_L + c_L, u_R + c_R\} \quad (8)$$

接触间断的速度

$$S_M = \frac{p_R - p_L + \rho_L u_L (S_L - u_L) - \rho_R u_R (S_R - u_R)}{\rho_L (S_L - u_L) - \rho_R (S_R - u_R)} \quad (9)$$

由特征关系可以得到, 经过左侧和右侧激波, 相体积分数保持不变^[4-5,7-8]:

$$\alpha_{1,J}^* = \alpha_{1,J} \quad (10)$$

其中 $J = L, R$ 代表接触间断的左侧及右侧。由 $(\alpha_1 \rho_1), (\alpha_2 \rho_2)$ 和 ρu 方程的守恒性可得

$$(\alpha_k \rho_k)_J^* = (\alpha_k \rho_k)_J \frac{S_J - u_J}{S_J - S_M} \quad (11a)$$

$$u_L^* = u_R^* = u^* = S_M \quad (11c)$$

$k = 1, 2$ 分别代表相 1 和相 2。对于 $(\alpha_1 \rho_1 E_1)$ 和 $(\alpha_2 \rho_2 E_2)$ 在激波两侧的变化而言, 虽然有非守恒项 $\mathbf{B}(\mathbf{Q}) \partial_x \mathbf{Q}$ 的存在, 但是依然假设其是守恒的, 同样由 RH 关系确定^[5], 即

$$E_{k,J}^* = E_k + (S_M - u_J) \left(S_M + \frac{\alpha_{k,J} p_{k,J}}{\rho_{k,J} (S_J - u_J)} \right) \quad (12)$$

此时, 非守恒性则主要体现在接触间断左右^[6,9]。

本文采用一阶显式时间推进的通量差分裂 (Flux-difference splitting-FDS) 的形式^[5,7]。通量差分裂的形式来自于守恒型方程的求解, 其没有显式包含通量 $\mathbf{F}(\mathbf{Q})$ 的形式, 而是对拟线性系数 $\mathbf{A}(\mathbf{Q})$ 的分裂, 因此可以拓展到非守恒型方程^[14], 即

$$\mathbf{Q}_j^{n+1} = \mathbf{Q}_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathcal{A}^+ \Delta \mathbf{Q}_{j-1/2}^n + \mathcal{A}^- \Delta \mathbf{Q}_{j+1/2}^n) \quad (13)$$

式中上标 n 代表第 n 个时间步的状态量, 其中通量差分裂为

$$\mathcal{A}^\pm \Delta \mathbf{Q}_{j\mp 1/2} = \sum_{l=1}^{M_w} (s_l)^\pm \mathbf{W}_{l,j=1/2} \quad (14)$$

M_w 是 Riemann 求解器下的波的数目, 对于 HLLC 型求解器而言 $M_w = 3, s_l$ 是第 l 道波的波速, $\mathbf{W}_l = \mathbf{Q}_{l,R} - \mathbf{Q}_{l,L}$ 则是第 l 道波右状态和左状态的差。

$$(s_l)^+ = \max\{s_l, 0\}, (s_l)^- = \min\{s_l, 0\} \quad (15)$$

分别代表了向右和向左传播的波速。此方法求解的稳定性要求最大 CFL 数 $\max_{\forall l,j} \{|s_{l,j+1/2}| \} \Delta t / \Delta x$ 小于 1。2.2 节将介绍突破此 CFL 数限制 的显式大时间步方法。

齐次方程求解后, 非平衡源项的松弛过程则是求解方程

$$\partial_t \mathbf{Q} = \mathbf{S}_p, \mathbf{S}_T, \mathbf{S}_g \quad (16)$$

松弛过程可以依次求解上述偏微分方程^[7]; 如果仅考虑松弛系数 $\mu \rightarrow \infty, \theta \rightarrow \infty$ 以及 $\nu \rightarrow \infty$, 即松弛过程使非平衡压力、温度和化学势达到平衡时的状态, 则可以利用守恒关系建立松弛前后的状态量之间的代数方程进行求解, 而不用求解偏微分方程^[4-5]。

将压力平衡、压力-温度平衡、压力-温度-化学势平衡的过程依次记作压力松弛 (p -松弛)、温度松弛 (pT -松弛) 和化学势松弛 (pTg -松弛)。以压力松弛为例, 以上标 * 代表松弛后的状态量, 松弛前的状态量则不做记号。根据 \mathbf{S}_p 的形式, 松弛前后分相质量保持不变

$$(\alpha_k \rho_k)^* = (\alpha_k \rho_k) \quad (17)$$

以及混合物内能保持不变

$$(\alpha_1 \rho_1 e_1)^* + (\alpha_2 \rho_2 e_2)^* = (\alpha_1 \rho_1 e_1) + (\alpha_2 \rho_2 e_2) \quad (18)$$

结合状态方程

$$e_k^* = e_k(\rho_k^*, p_k^*), e_k = e_k(\rho_k, p_k) \quad (19)$$

两相松弛后压力平衡

$$p_1^* = p_2^* = p^* \quad (20)$$

可以建立松弛后的压力 p^* 满足的方程为二次方程, $a(p^*)^2 + b(p^*) + d = 0$, 其系数为

$$a = 1 + \alpha_1 \gamma_2 + \alpha_2 \gamma_1$$

$$b = \alpha_1 C_2 + \alpha_2 C_1 - \alpha_1 p_1 (\gamma_2 + 1) - \alpha_2 p_2 (\gamma_1 + 1) \quad (21)$$

$$d = -\alpha_1 p_1 C_2 - \alpha_2 p_2 C_1$$

参数 $C_k = p_1 (\gamma_k - 1) + 2 \gamma_k \pi_k$, 界面上的压力

$$p_I = \frac{Z_1 p_2 + Z_2 p_1}{Z_1 + Z_2} \quad (22)$$

式中 $Z_k = \rho_k c_k^2$ 为声阻抗。求得 p^* 后进一步通过

$$\alpha_k^* = \alpha_k \frac{(\gamma_k - 1) p^* + 2 p_k + C_k}{(\gamma_k + 1) p^* + C_k} \quad (23)$$

得到松弛后的相体积分数 α_k^* ，达到对界面的扩散作用。对于 pT -松弛而言，同样满足分相质量守恒与混合物内能守恒的式(17,18)以及状态方程式(19)，并且在此基础上需要满足压力与温度的平衡

$$p_1^* = p_2^* = p^* \quad (24)$$

$$T_1^* = T_2^* = T^* = \frac{p^* + \pi_k}{\rho_k^* C_{v,k} (\gamma_k - 1)}$$

此时， pT -松弛后的压力也满足二次方程，其系数可以参考文献[4,5]。而对于 pTg -松弛，由于两相之间存在相变，因此分相质量不再守恒，但是混合物质量依然守恒

$$(\alpha_1 \rho_1)^* + (\alpha_2 \rho_2)^* = (\alpha_1 \rho_1) + (\alpha_2 \rho_2) \quad (25)$$

此外，在压力和温度平衡的条件式(24)下，化学势平衡 ($g_1 = g_2$) 可以得到两相平衡的温度 p^* 和压力 T^* 满足饱和和曲线

$$A_s + \frac{B_s}{T^*} + C_s \ln(T^*) = \ln \frac{p^* + \pi_2}{(p^* + \pi_1)^{D_s}} \quad (26)$$

其中参数分别为

$$A_s = \frac{C_{p1} - C_{p2} + \eta'_2 - \eta'_1}{C_{p2} - C_{v2}}, B_s = \frac{\eta_1 - \eta_2}{C_{p2} - C_{v2}} \quad (27a)$$

$$C_s = \frac{C_{p2} - C_{p1}}{C_{p2} - C_{v2}}, D_s = \frac{C_{p1} - C_{v1}}{C_{p2} - C_{v2}} \quad (27b)$$

因此在 pTg -松弛下，结合式(17-19)和式(24-26)也可以建立代数方程，通过 Newton-Raphson 迭代求解。可以看到松弛过程有如下性质，对于单相情形， $\alpha_1 = \epsilon$ 或 $\alpha_1 = 1 - \epsilon$ ($\epsilon = 1 \times 10^{-8}$ 为小量)，松弛过程前后的压力、相体积分数等保持不变，即松弛过程对单相流动无影响；松弛前保持平衡的分相压力，在松弛后依然保持平衡且与松弛前的状态相同；同时，松弛过程的求解是局部的，其只与当前单元内的状态量相关。

在二维情况下，齐次方程的求解为了抑制数值振荡采用对称维数分裂的方法^[22]，并同样使用了FDS形式，如图1所示。

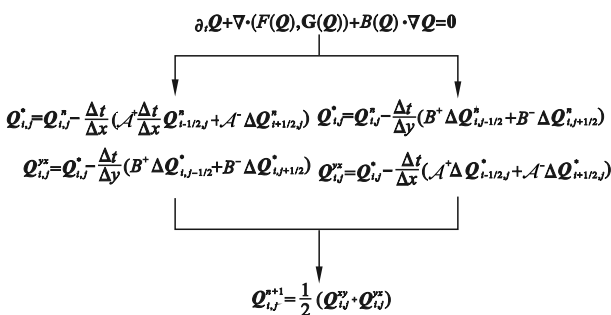


图1 对称维数分裂方法

Fig. 1 Sketch of symmetric dimensional splitting schemes

而松弛过程是对单元内状态量的处理，依然在齐次方程求解后进行。

综上，两相流六方程模型的求解可以简记为

$$\mathbf{Q}^{n+1} = \mathcal{L}_{\text{relax}} \mathcal{L}_h^{\text{HLLC}} \mathbf{Q}^n \quad (28)$$

式中 $\mathbf{Q}^{n+1} \mathcal{L}_h^{\text{HLLC}}$ 代表 HLLC 近似 Riemann 求解器求解齐次方程， $\mathcal{L}_{\text{relax}}$ 代表松弛过程的求解。

2.2 六方程模型的显式大时间步方法

将双曲守恒型方程的求解过程采用的 LTS 方法推广到六方程模型中，得到 LTS-HLLC 格式。该格式的原理与叠波法相同，即单元内的状态量变化是所有单元界面产生的波引起增量的线性叠加^[13,14,16-18]。

以一维为例考察单元 j 上的状态量变化 $\Delta \mathbf{Q}_j = \mathbf{Q}_j^{n+1} - \mathbf{Q}_j^n$ ，是所有与此单元相交的波产生的增量总和。不失一般性，假设界面上只产生一道波，如图2所示。

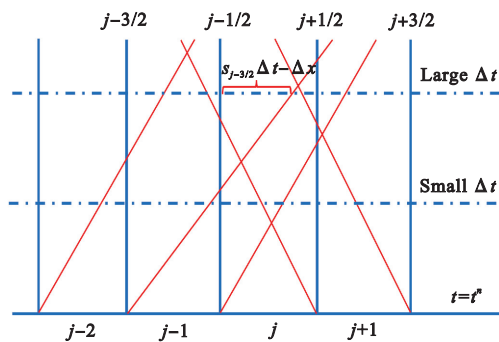


图2 大时间步格式

Fig. 2 Large time step scheme sketch

当 Δt 较小时，单元 j 仅与两边界面 $j-1/2$ 和 $j+1/2$ 处产生的波相交，因此 $\Delta \mathbf{Q}_j$ 只与这两个界面相关，即 $\Delta \mathbf{Q}_j = \Delta \mathbf{Q}_{j-1/2}^f + \Delta \mathbf{Q}_{j+1/2}^f$ ，其中 $\Delta \mathbf{Q}_{j\pm 1/2}^f$ 代表界面 $j \pm 1/2$ 对单元 j 产生的增量。而当 Δt 较大时，还与界面 $j-3/2$ 和 $j+3/2$ 产生的波相交，因此

$$\Delta \mathbf{Q}_j = \Delta \mathbf{Q}_{j-3/2}^f + \Delta \mathbf{Q}_{j-1/2}^f + \Delta \mathbf{Q}_{j+1/2}^f + \Delta \mathbf{Q}_{j+3/2}^f \quad (29)$$

由此考虑所有界面对单元 j 产生的增量则有

$$\Delta \mathbf{Q}_j = \sum_{i=0}^{\infty} (\Delta \mathbf{Q}_{j-1/2-i}^f + \Delta \mathbf{Q}_{j+1/2+i}^f) \quad (30)$$

对于 $\Delta \mathbf{Q}_{j-1/2-i}^f$ 的确定，以 $j-3/2$ 处的波为例，假设其波速为 $s_{j-3/2}$ ，该波右侧与左侧的状态量差为 $\mathbf{W}_{j-3/2} = \mathbf{Q}_{i-1} - \mathbf{Q}_{i-2}$ 。如图2所示，该波向右运动并且完全穿过单元 $j-1$ ，因此使其产生的增量是 $-\mathbf{W}_{j-3/2}$ ；同时，该波与单元 j 相交，截距为 $s_{j-3/2} \Delta t - \Delta x$ 。注意到其也可能与界面 $j+1/2$ 和 $j+3/2$ 产生的波相交，对此，叠波法中假设为不同界面产生的波相交后强度和方向均保持不变，因此不用考虑不同波系之间相互作用^[13-14]。所以，其对单元 j 产生的增量为

$$\Delta Q_{j-3/2}^f = \left(\frac{s_{j-3/2} \Delta t}{\Delta x} - 1 \right) (-W_{j-3/2}) \quad (31)$$

若该波也完全穿过单元 j , 即 $C_{j-3/2} - 1 > 1$, 则其产生的增量依然是 $-W_{j-3/2}$; 若该波并未与单元 j 相交, 即 $C_{j-3/2} - 1 < 0$, 则其产生增量为 0。因此 $j - 3/2$ 处的波对 Q_j^n 产生的增量可以写成

$$\Delta Q_{j-3/2}^f = -\max \left\{ \min \left\{ c_{j-3/2} - 1, 1 \right\}, 0 \right\} W_{j-3/2} \quad (32)$$

类似地, 对于 $j + 3/2$ 处的波对 Q_j^n 产生的增量可以写成

$$\Delta Q_{j+3/2}^f = -\min \left\{ \max \left\{ c_{j+3/2} + 1, -1 \right\}, 0 \right\} W_{j+3/2} \quad (33)$$

综上, 可以得到通量差分裂形式的 LTS-HLLC 格式

$$\begin{aligned} \Delta Q_j &= Q_j^{n+1} - Q_j^n = \\ &= -\frac{\Delta t}{\Delta x} \sum_{i=0}^{\infty} (\mathcal{A}_{j-1/2-i}^{i+} \Delta Q_{j-1/2-i} + \mathcal{A}_{j+1/2+i}^{i-} \Delta Q_{j+1/2+i}) \end{aligned} \quad (34)$$

其中

$$\mathcal{A}_{j-1/2-i}^{i+} \Delta Q_{j-1/2-i} = \sum_{l=1}^{M_w} (s_{l,j-1/2-i})^{i+} W_{l,j-1/2-i} \quad (35a)$$

$$\mathcal{A}_{j+1/2+i}^{i-} \Delta Q_{j+1/2+i} = \sum_{l=1}^{M_w} (s_{l,j+1/2+i})^{i-} W_{l,j+1/2+i} \quad (35b)$$

分别代表在界面 $j - 1/2 - i$ 处的向右和 $j + 1/2 + i$ 向左传递的波产生的增量, 而

$$\begin{aligned} (s_{l,j-1/2-i})^{i+} &= \max \left\{ \min \left\{ s_{l,j-1/2-i} - \frac{i\Delta x}{\Delta t}, \frac{\Delta x}{\Delta t} \right\}, 0 \right\} \\ (s_{l,j+1/2+i})^{i-} &= \min \left\{ \max \left\{ s_{l,j+1/2+i} + \frac{i\Delta x}{\Delta t}, -\frac{\Delta x}{\Delta t} \right\}, 0 \right\} \end{aligned} \quad (36)$$

显然当 $|s_{l,j+1/2}| < \Delta x / \Delta t$ 时, 即 CFL 数小于 1 时, $\mathcal{A}_{j-1/2-i}^{i+} \Delta Q_{j-1/2-i}$ 和 $\mathcal{A}_{j+1/2+i}^{i-} \Delta Q_{j+1/2+i}$ 退化为经典形式式(14)。因此, 式(35)是经典通量差分裂形式式(14)的推广, 并且完全兼容了 CFL 数小于 1 的情况。可以看到, 推导过程并没有假定方程的守恒性, 仅假设了方程的双曲性质, 因此式(35)的形式在非守恒型与守恒型方程中都适用。

在两相流六方程模型的求解中, 齐次方程的求解改为利用 LTS-HLLC 格式, 即

$$Q^{n+1} = \mathcal{L}_{\text{relax}} \mathcal{L}_h^{\text{LTS-HLLC}} Q^n \quad (37)$$

以上相关算法基于开源代码 CLAWPACK^[23] 进行改进和计算。对于边界条件, 本文主要采用外插型

边界条件以减小边界条件对格式的影响。

3 计算结果与分析

验证两相流六方程模型下的 LTS-HLLC 格式, 验证算例为 CO₂ 两相激波管 (liquid-vapor shock tube)^[24]。CO₂ 两相激波管算例考察了 LTS-HLLC 格式对激波、膨胀波和接触间断的分辨率。在刚性气体状态方程的假设下, CO₂ 在液态和汽态下的物质参数列入表 1。

表 1 CO₂ 两相激波管算例汽液态的物质参数^[25]

Tab.1 Material parameters of liquid and vapor in the CO₂ liquid-vapor shock tube case^[25]

	Liquid	Vapor
γ	1.23	1.06
π	1.32e8	8.86e5
η	-6.23e5	-3.01e5
η'	1.09e3	1.78e3
C_v	2440	2410

3.1 LTS-HLLC 格式下的一维验证算例

CO₂ 两相激波管算例描述的是在计算域 $x \in [0, 80]$ 中, 初始场在 $x = 50$ 处存在一个间断, 间断左(L)右(R)两端的压强分别是 $p_L = 60$ bar 和 $p_R = 10$ bar (1 bar = 10⁵ Pa), 并且温度处于平衡状态 $T = 273$ K。在此间断下将产生激波、膨胀波、接触间断以及蒸发波 (evaporation wave)。CO₂ 激波管算例将测试两种不同的相体积分布, 即

$$(1): \begin{cases} \alpha_{vL} = 0.3 \\ \alpha_{vR} = 0.7 \end{cases}, (2): \begin{cases} \alpha_{vL} = 1 \times 10^{-8} \\ \alpha_{vR} = 1 - 1 \times 10^{-8} \end{cases} \quad (38)$$

分别记作算例 1 和算例 2, 算例 1 是两相完全混合的状态, 而算例 2 中两相具有明显的界面。计算网格分辨率 $\Delta x = 0.08$ (单元数 1000), 算例中采用单元数 20000 的结果视作参考解 (记作 Reference)。比较物理时间 $t = 0.08$ s 时相体积分数 α_v 、混合物密度 $\rho = \alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2$ 、压力 p 和速度 u 的分布。

图 3 展示了算例 1 在不同松弛过程下参考解的结果。在算例 1 中, $x = 50$ 处压力间断产生了向左传播的膨胀波 ($x = 30 \sim 40$) 和向右传播的接触间断 ($x \approx 52$)、激波 ($x \approx 63$)。 p -松弛和 pT -松弛下的结果比较接近, 而与 pTg -松弛的结果不同。注意到压力为 $p = 60$ bar 下对应的饱和温度 $T_{sat}(p) = 41$ K。在初始温度 $T = 273$ K 下, 液态 CO₂ 将会完全蒸发为汽态, 因此采用 pTg -松弛后, 计算域内的相体积分数就变为 $1 - 1 \times 10^{-8}$, 即全为汽态, 成为单相下的激波管, 如图 3 的橙色曲线。图 4~图 6

则分别展示了算例 1 在 p -松弛、 pT -松弛和 pTg -松弛下不同 CFL 数的结果比较。可以看到,在 p -松弛和 pT -松弛下,随着 CFL 数的提升(从 0.57 增加到 4.58),在膨胀波和激波附近的耗散增加,误差逐渐增大;而在接触间断附近,不同 CFL 数下的结果基本相同。这与 Euler 方程下 LTS 格式的结论相反^[13-17]。

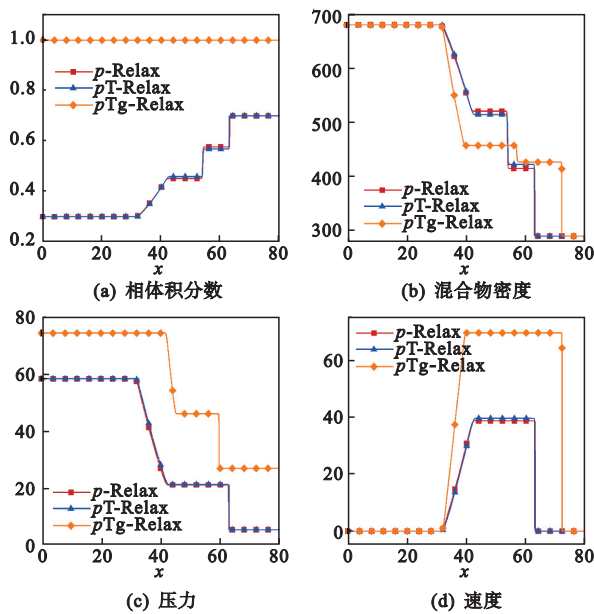


图 3 算例 1 的不同松弛模型下 CO₂ 两相激波管的结果比较
Fig. 3 Comparison of results of CO₂ two-phase shock tube case 1

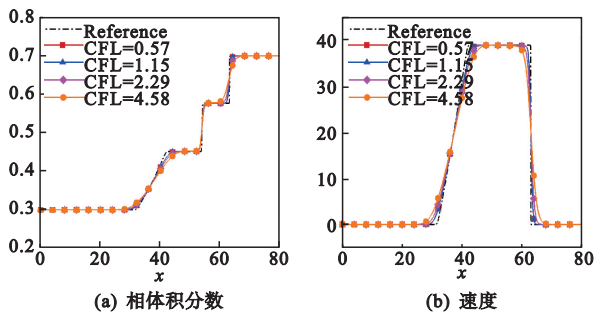


图 4 算例 1 的 p -松弛下不同 CFL 数的结果比较
Fig. 4 Comparison of the results with different CFL number in case 1 with p -Relax

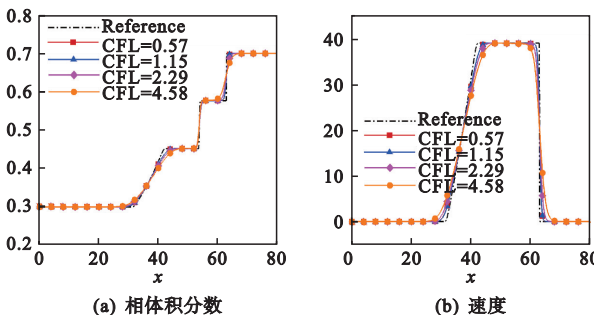


图 5 算例 1 的 pT -松弛下不同 CFL 数的结果比较
Fig. 5 Comparison of the results with different CFL number in Case 1 with pT -Relax

另一方面,在 pTg -松弛下,液态的 CO₂ 汽化,计算域内成为单相的汽态 CO₂,其结果与 Euler 方程中的结论相同,即随着 CFL 数的提升,对间断的分辨率提高,误差减小。

算例 2 的不同松弛过程下的参考解的比较如图 7 所示。可以看到在算例 2 中, p -松弛和 pT -松弛的结果几乎重合,其与 pTg -松弛的结果有所不同。在 p -松弛或 pT -松弛中,主要包含了向左传播的膨胀波 $x \approx 14 \sim 18$,向右传播的激波 $x \approx 66.9$ 和接触间断(相界面) $x \approx 51$;而 pTg -松弛则包含了一道蒸发波 $x \approx 50$,其主要来自于两相界面处由于相变产生的传质作用。

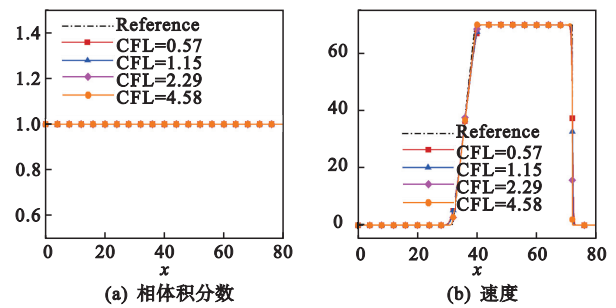


图 6 算例 1 的 pTg -松弛下不同 CFL 数的结果比较
Fig. 6 Comparison of the results with different CFL number in case 1 with pTg -Relax

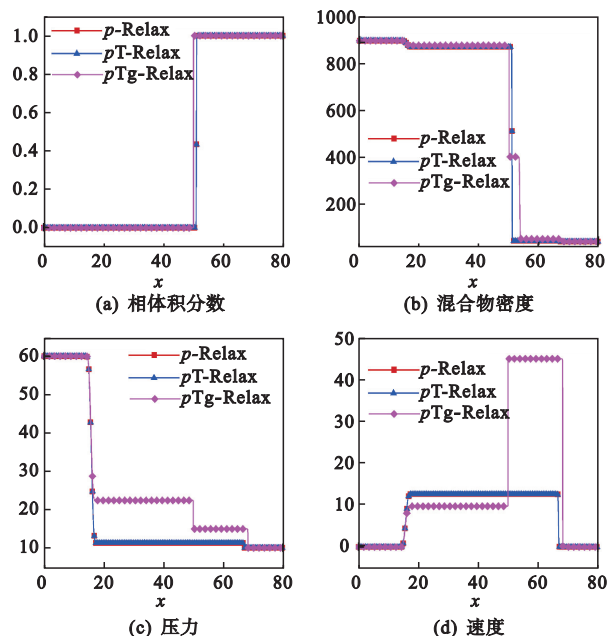


图 7 算例 2 的不同松弛模型下 CO₂ 两相激波管的结果比较
Fig. 7 The comparison of results of CO₂ two-phase shock tube in case 2 with different relaxation models

为了更加清晰地比较不同 CFL 数下的结果,图 8 和图 9 展示了算例 2 在 p -松弛、 pTg -松弛下计算结果与参考解的误差,定义为 $\delta a = a - a_{\text{Reference}}$ 。

由于 p -松弛和 pT -松弛的结果几乎相同,所以

在算例 2 的讨论中,主要以 p -松弛(图 8)和 pTg -松弛(图 9)的结果做比较。从图 8 可以看到,CFL 数为 1.39 的结果误差最小,CFL 数为 0.28 或 3.48 的误差较大。在相界面处,相体积分数的误差($\delta\alpha_v$)基本相同,主要来自于数值耗散。此外在膨胀波和激波处,速度误差(δu)则在 CFL 数为 1.39 时最小。当 CFL 数大于 4 时,结果已经发散。这一结果的趋势和 Euler 方程中 LTS-HLLC 的结果类似,提高 CFL 数时,LTS-HLLC 对激波和膨胀波的分辨率上升,误差先减小;进一步提高 CFL 数,由于 LTS-HLLC 耗散较小,导致间断附近出现振荡甚至发散。

pTg -松弛下不同 CFL 数的结果比较如图 9 所示。同样的,CFL 数为 1.39 时误差最小;另一方面,CFL 数大于 3 时,结果发散;而在 p -松弛下,CFL 数能够达到 3.48。

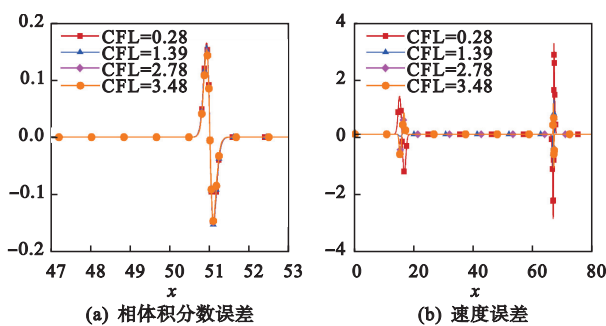


图 8 算例 2 在 p -松弛下不同 CFL 数的误差比较

Fig. 8 Comparison of error with different CFL numbers in case 2 with p -Relax

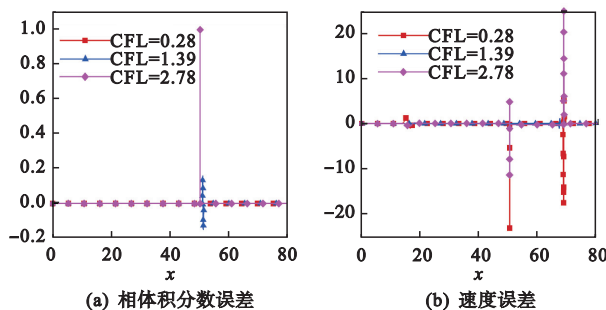


图 9 算例 2 的 pTg -松弛下不同 CFL 数的误差比较

Fig. 9 Comparison of error with different CFL numbers in case 2 with pTg -Relax

3.2 LTS-HLLC 格式下的二维验证算例

验证 LTS-HLLC 格式在二维情况下的算例,算例依然采用汽液两相的 CO_2 激波管,物质参数列入表 1。计算域大小以及初始条件设置如图 10 所示。

在 $[0,80] \times [0,80]$ 区域内的左下角 $[0,50] \times [0,50]$ 具有高压 $p=60$ bar,其余部分则为低压 $p=10$ bar,同样考察计算终止时间为 $t=0.08$ s 的结果,网格分辨率 $\Delta x=\Delta y=0.4$ 。算例 3 与算例 1 类似,为两相混合物状态,算例 4 与算例 2 类似,两

相有明显界面。本节仅比较压力松弛下相体积分数的 α_v 和速度大小 $|u|$ 的结果。

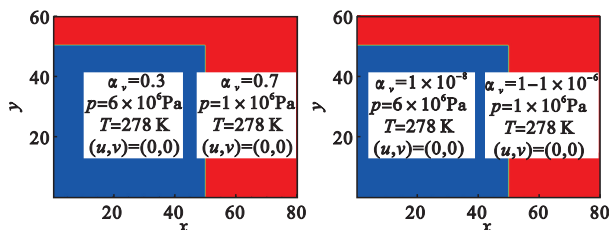


图 10 二维算例 3(左图)和算例 4(右图)初始条件

Fig. 10 Initial conditions of two dimensional case 3 and case 4

算例 3 的不同 CFL 数下结果如图 11 所示。可以看到与算例 1 相同,在混合物状态下,提高 CFL 数,膨胀波、接触间断以及激波等间断的分辨率均有所下降。

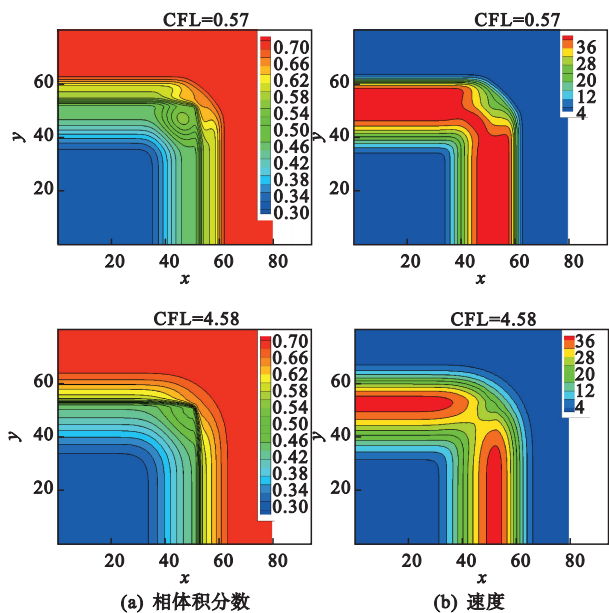


图 11 算例 3 的不同 CFL 数(0.57,4.58)下的相体积分数和速度云图

Fig. 11 Contours of volume fraction and magnitude of velocity in case 3 with different CFL numbers (0.57,4.58)

算例 4 的不同 CFL 数下相体积分数的 α_v 和速度大小 $|u|$ 的结果如图 12 所示。可以看到与算例 2 相同,在两相有明显界面的状态下,提高 CFL 数能够明显提升对膨胀波、接触间断和激波的分辨率。此外,算例 4 达到的最大 CFL 数仅有 1.39,而算例 2 则可以达到 3.48。

3.3 结果讨论

在两相流六方程模型中,在相界面的运动, CO_2 激波管算例 2 和 4 中看到,LTS 格式下增大 CFL 数对激波等非线性间断以及接触间断等线性间断的分辨率有提升效果,这与双曲守恒型方程的 LTS 格式的效果相同;但是,在 CO_2 激波管的算例 1 和算例 3 中,却得了相反的结果,提高 CFL 数在

间断附近的耗散得到增强,对间断的分辨率降低;并且随着 CFL 数的增大,耗散增大。

算例 1 的没有松弛过程下($Q^{n+1}=\mathcal{L}_h^{LTS-HLLC} Q^n$)计算的结果如图 13 所示(为了方便起见,只比较了 CFL 数为 0.57 和 2.29)。可以看到,对于无松弛过程的每一相以及混合物而言,提升 CFL 数依然减小了数值耗散,对间断的分辨率有提升。

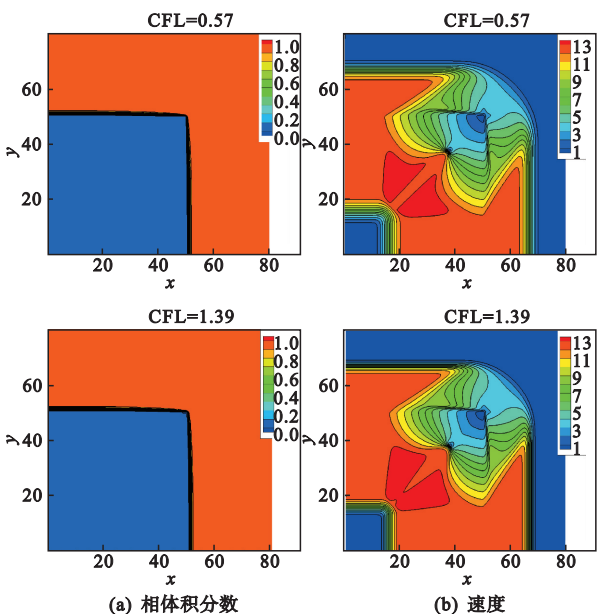


图 12 算例 4 的不同 CFL 数(0.57, 1.39)下的相体积分数和速度云图

Fig. 12 Contours of volume fraction and magnitude of velocity in case 4 with different CFL numbers (0.57, 1.39)

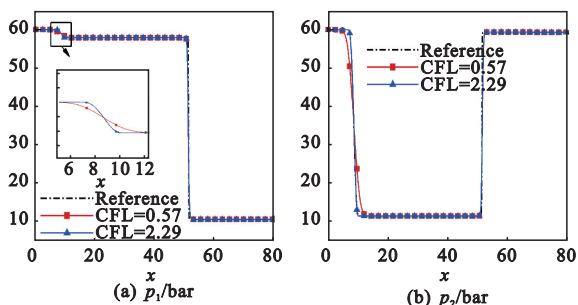


图 13 算例 1(无松弛过程)不同 CFL 数的分相压力结果比较
Fig. 13 Comparison of the phasic pressure in case 1 (without relaxation) with different CFL numbers

从松弛过程来看,松弛过程是使不平衡的分相压力(p_1, p_2)在守恒关系下达到平衡,并使相体积分数变化,如式(23)所示达到界面扩散的效果。显然,平衡时的压力大小在分相压力之间;不平衡的压力差越小,松弛前后的相体积分数变化也越小。从 HLLC 型的 Riemann 求解器可以看到,虽然两相流的六方程模型是非守恒型方程,但是对于每一相而言,依然做了守恒性的假设,即分相的质量和能量是守恒的,如式(11,12)所示。因此在没有松

弛过程的情况下,LTS 格式的效果和在单相方程(Euler 方程)中的效果相同,如图 13 所示。但是考虑松弛过程时,CFL 数 0.57 下通过四个时间步四次松弛过程,而 CFL 数 2.29 下只需要一个时间步一次松弛过程。而每次松弛过程都会使得分相压力平衡 $p_1 = p_2$,因此,CFL 数 0.57 时的分相压力差更小,松弛过程对相体积分数的扩散作用减小。

综上,对于非守恒型的两相流六方程模型的 LTS 格式而言,松弛过程与 LTS 格式相互影响。在齐次方程的求解中,LTS-HLLC 格式下增大 CFL 数可以减小了数值粘性,提升了对间断的分辨率;而松弛过程对相界面间断有扩散作用,在混合物状态下,对间断分辨率的提升增强了松弛过程的扩散作用,并大于增大 CFL 数减小的耗散,最终使得增大 CFL 数耗散得到增强,误差增大。而在两相明显分离的状态下,由于大部分区域为单相,六方程模型在这些区域内退化为 Euler 方程,并且松弛过程在单相区域不起作用,因此 LTS-HLLC 格式可以提升间断的分辨率。

本文采用的验证算例下不同 CFL 数计算消耗的 CPU 时间如图 14 所示。

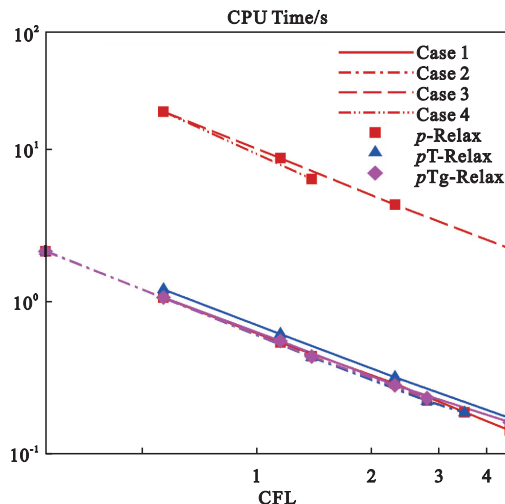


图 14 本文验证算例在不同 CFL 数下的 CPU 时间(单位:s)
Fig. 14 CPU time of the cases with different CFL numbers (Unit:s)

可以看到,CFL 数的提高使得 CPU 时间等比例降低。本文算例可以使计算效率提高 3~5 倍。此外,LTS 格式兼容了经典时间推进格式,在 Δt 较小时自动退化为经典格式。

4 结 论

与守恒型的单相方程(Euler)方程不同的是,两相流六方程模型是非守恒型方程,并具有非平衡

的源项。基于密度的两相流六方程模型的求解过程中,时间步长受到 CFL 数小于 1 的限制,计算效率较低。由六方程模型的双曲型特点,在线性波的假设下,本文推导了基于 HLLC 型近似 Riemann 求解器的显式大时间步格式(LTS-HLLC 格式),得到以下结论。

(1) 通量差分裂形式适用于双曲守恒型与非守恒型方程,由其推广得到的 LTS-HLLC 格式在两相流六方程模型的求解中可以突破 CFL 数小于 1 的限制,显著提升计算效率。

(2) 在两相明显分离的区域内,六方程模型在单相区域退化为 Euler 方程,并且松弛过程不起作用。此时, LTS-HLLC 格式下提高 CFL 数可以提升对激波等间断的分辨率,减小数值耗散,也容易产生数值振荡;

(3) 在两相混合的区域,增大 CFL 数虽然提高了每一相的间断分辨率,但同时提高松弛过程的扩散作用,增大了耗散,使得对间断的分辨率反而有所降低。

参考文献(References):

- [1] Hirt C W, Nichols B D. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries[J]. *Journal of Computational Physics*, 1981, **39**(1):201-225.
- [2] Baer M R, Nunziato J W. A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (DDT) in reactive granular materials[J]. *International Journal of Multiphase Flow*, 1986, **12**(6):861-889.
- [3] Kapila A K, Menikoff R, Bdzil J B, et al. Two-phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular materials: Reduced equations[J]. *Physics of Fluids*, 2001, **13**(10):3002-3024.
- [4] Richard S, Petitpas F, Berry R A. Simple and efficient relaxation methods for interfaces separating compressible fluids, cavitating flows and shocks in multiphase mixtures [J]. *Journal of Computational Physics*, 2009, **228**(5):1678-1712.
- [5] Pelanti M, Shyue K M. A mixture-energy-consistent six-equation two-phase numerical model for fluids with interfaces, cavitation and evaporation waves[J]. *Journal of Computational Physics*, 2014, **259**:331-357.
- [6] De Lorenze M, Pelanti M, Lafon P. HLLC-type and path-conservative schemes for a single-velocity six-equation two-phase flow model: A comparative study [J]. *Applied Mathematics and Computation*, 2018, **333**:95-117.
- [7] Pelanti M. Arbitrary-rate relaxation techniques for the numerical modeling of compressible two-phase flows with heat and mass transfer[J]. *International Journal of Multiphase flow*, 2022, **153**:104097.
- [8] Dumbse M, Balsara D S. A new efficient formulation of the HLLEM Riemann solver for general conservative and non-conservative hyperbolic systems [J]. *Journal of Computational Physics*, 2016, **304**:275-319.
- [9] Saurel R, Le Metayer O, Massoni J, et al. Shock jump relations for multiphase mixtures with stiff mechanical relaxation[J]. *Shock Waves*, 2007, **16**(3):209-232.
- [10] Schwendeman D W, Wahle C W, Kapila A K. The Riemann problem and a high-resolution Godunov method for a model of compressible two-phase flow[J]. *Journal of Computational Physics*, 2006, **212**(2):490-526.
- [11] Tokareva S A, Toro E F. HLLC-type Riemann solver for the Baer-Nunziato equations of compressible two-phase flow[J]. *Journal of Computational Physics*, 2010, **229**(10):3573-3604.
- [12] Tian B L, Toro E F, Castro C E. A path-conservative method for a five-equation model of two-phase flow with an HLLC-type Riemann solver[J]. *Computers & Fluids*, 2011, **46**(1):122-132.
- [13] LeVeque R J. A large time step generalization of Godunov's method for systems of conservation laws[J]. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 1985, **22**(6):1051-1073.
- [14] LeVeque R J. Finite volume methods for hyperbolic problems[J]. *Meccanica*, 2004, **39**(1):88-89.
- [15] 钱战森. Godunov 型显式大时间步长格式研究进展. *航空学报*, 2020, **41**(7):023575 (QIAN Zhan-sen S. Research progress of Godunov type explicit large time step scheme [J]. *Acta Aeronautica et Astronautica Sinica*, 2020, **41**(7):81-109. (in Chinese)).
- [16] Lindqvists S, Aursand P, Flåtten T, et al. Large time step TVD schemes for hyperbolic conservation laws [J]. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 2016, **54**(5):2775-2798.
- [17] Prebeg M, Flåtten T, Muller B. Large time step HLL and HLLC schemes[J]. *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 2018, **52**(4):1239-1260.
- [18] Morales-Hernandez M, Garcia-Navarro P, Murillo J. A large time step 1D upwind explicit scheme (CFL > 1): Application to shallow water equations[J]. *Journal of Computational Physics*, 2012, **231**(19):6532-6557.
- [19] Xu R Y, Zhong D Y, Xu B S, et al. A large time step Godunov scheme for free-surface shallow water equa-

- tions[J]. *Chinese Science Bulletin*, 2014, **59** (21): 2534-2540.
- [20] Sofia L, Lund H. A large time step Roe scheme applied to two-phase flow[A]. 7th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering[C]. 2016.
- [21] Prebeg M, Flåtten T, Müller B. Large time step Roe scheme for a common 1D two-fluid model[J]. *Applied Mathematical Modelling*, 2017, **44**:124-142.
- [22] Dong H T, Liu F J. Large time step wave adding scheme for systems of hyperbolic conservation laws [J]. *Journal of Computational Physics*, 2018, **374**: 331-360.
- [23] LeVeque R J, Berger M J. *CLAWPACK Software Version 4.9*[M]. 2021.
- [24] Lund H, Aursand P. Two-phase flow of CO₂ with Phase Transfer [J]. *Energy Procedia*, 2012, **23**: 246-255.

An investigation on the explicit large-time step scheme in the density-based two-phase flow solver

HUANG Yi* , YU Hai-dong, YOU Tian-qing

(Beijing Institute of Astronautical System Engineering, Beijing 100076, China)

Abstract: The two-phase flow six-equation model is a hyperbolic non-conservative system, with non-equilibrium source terms. The density-based numerical method contains the solution of the homogeneous hyperbolic equations and relaxation of the non-equilibrium source terms. In the solution of homogeneous equations, the time step with Godunov's scheme is limited by the CFL number less than 1, which leads to low computation efficiency. The large time step scheme is one of the important methods to break the limit in hyperbolic conservative equations. Under the linear wave assumption, this research extends the flux-difference splitting type of LTS scheme to solving the non-conservative two-phase six-equation model and proposes the LTS scheme (LTS-HLLC) based on HLLC type Riemann solver. It is found that increasing the CFL number with the LTS-HLLC scheme can reduce the numerical viscosity in two-phase regions with obvious interfaces, improve the resolution of the discontinuity, like shocks, and produce oscillations easily, which is the same as those in the hyperbolic conservative equations with the LTS scheme. However, in two-phase mixture regions, increasing CFL number can enhance the diffusion of the relaxation process, reducing the resolution of the discontinuity. Increasing the CFL number with LTS-HLLC scheme can effectively reduce the CPU time and improve the computation efficiency.

Key words: two-phase flow; large time step; non-conservative equations; relaxation method; wave adding method