



论文

离散空间直接建模的计算流体力学方法

徐昆^{①④}, 李启兵^{②*}, 黎作武^③

① 香港科技大学数学系, 香港;

② 清华大学航天航空学院, 北京 100084;

③ 中国空气动力研究与发展中心, 绵阳 621000;

④ 北京大学湍流和复杂系统国家重点实验室, 北京 100871

*联系人, E-mail: lqb@tsinghua.edu.cn

收稿日期: 2013-09-04; 接受日期: 2013-11-20

国家自然科学基金(批准号: 11172154)和香港大学教育资助委员会(编号: 621011)资助项目

摘要 本文提出了一种发展适合多尺度、多物理流动的 CFD 格式的全新途径, 即直接在离散空间利用物理模型的跨尺度演化解来建立数值格式的新方法. 与直接离散偏微分方程的传统做法相比, 基于离散空间直接建模构造出的数值方法考虑了网格尺度和物理模型之间的匹配, 能做到不同尺度上物理模型的连续过渡, 从而实现对多尺度流动的高效模拟. Boltzmann 方程的模型演化解为直接建模方法提供了重要的支撑. 本文提出了直接建模构造计算流体力学方法的理论基础, 并给出了在建立统一气体动力学格式中的成功运用, 验证了新方法的可行性和优越性.

关键词 偏微分方程数值解, 离散空间直接建模, 多尺度流动, 统一气体动力学格式, BGK 方程

PACS: 47.11.-j, 02.60.-x, 51.10.+y, 47.45.-n

doi: 10.1360/SSPMA2013-00054

1 引言

计算流体力学(CFD)通过数值方法求解流动问题, 获得流场在离散空间中的定量描述, 进而预测流体运动规律. 从 1922 年 Richardson 尝试采用数值计算方式求解偏微分方程(PDE)开展天气预报工作开始, 随着高速计算机的出现, 到 20 世纪 60 年代, 传统计算流体力学的框架体系逐步得到建立, 进而成为与理论解析和实验研究地位同等重要的流体力学研究方法^[1,2]. 近半个世纪以来, 计算机技术得到了迅猛发展, CFD 方法取得了长足进步, 在航空航天等工

业领域得到了广泛的应用. 然而, 现有数值方法与实际应用的要求仍然存在很长的距离. 湍流、跨流域流动等多尺度流动问题就是其中比较典型的例子. 在计算资源有限的条件下, 工业领域迫切要求对流场进行越来越细致的时空刻画. 因此, 发展新型高精度、高效的数值方法是 CFD 领域面临的重要挑战^[3-5].

传统 CFD 方法是通过直接离散描述流体运动的偏微分方程而建立起来的, 如 Euler, Navier-Stokes(NS), Burnett, Boltzmann 方程等. 不同 PDE 的建立基础(假设)不同, 因而具有不同的适用范围. 比如, NS 方程基于连续介质假设, 只能适用于宏观流动. 而 Boltzmann

引用格式: 徐昆, 李启兵, 黎作武. 离散空间直接建模的计算流体力学方法. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2014, 44: 519-530

Xu K, Li Q B, Li Z W. Direct modeling-based computational fluid dynamics (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2014, 44: 519-530, doi: 10.1360/SSPMA2013-00054

方程基于气体分子(粒子)混沌假设, 其模型尺度是分子平均碰撞时间和平均自由程. 虽然 Boltzmann 方程理论上可以适用于从连续到稀薄的跨流域流动^[6], 但其要求在任何地方都能分辨出分子的微观运动尺度, 也就是所谓的动理学尺度(Kinetic Scale), 所以直接把 Boltzmann 方程用于宏观流体的计算是不现实的. 这些不同的模型方程实际上是在不同尺度上描述流体运动(下文将对此展开讨论), 因而逼近真实流动的近似程度不同. 在流体计算中由于网格尺度的加入, 使得问题更加复杂. 虽然通常认为当网格尺度足够小时, 直接离散 PDE 得到的数值解能以任意的精度逼近 PDE 解析解, 但它对真实物理流动的描述还受限于 PDE 模型本身. 因此, 数值解逼近真实流动的精度不光与计算网格有关, 而且与所选用的 PDE 模型有关. 对于跨流域流动这种多尺度流动问题, 不同流域需要选取不同的 PDE, 在过渡区, 甚至找不到一个合适的 PDE 模型, 从而导致数值计算的难度太大. 一个很有意思的问题是, 能否直接在离散空间上建立流动的(数值)物理模型, 从而通过数值解来直接逼近物理解? 这也正是本文将要重点探讨的内容.

本文以多尺度流动问题为例, 首先分析了不同尺度下描述流动的物理模型, 回顾了传统的基于直接离散 PDE 的 CFD 方法, 进而提出发展 CFD 方法的一条全新途径, 即在离散空间直接建模的方法. 以近年来发展起来的适用于跨流域流动的统一气体动理学格式(UGKS)为例, 对新思路进行了验证和分析. 另外, 当前传统的基于 Riemann 解的格式在高超声速流动计算中遇到了瓶颈, 现在是进一步思考和发展下一代数值计算方法的关键时代. 本文最后对此进行了一定的讨论.

2 流动的描述尺度与物理模型

对真实流动的描述首先应该基于一定的最小可分辨尺度, 不同描述尺度下能看到不同的流动细节, 以此可以建立不同的流动物理模型, 通常为偏微分方程. 事实上, 工程应用中关心的也是在某个有限分辨率下的物理量, 如速度、温度和压力等, 或者说是具有最小可分辨尺度的微元内的平均值. 小于最小尺度的流动变化则反映在物理模型中, 如宏观方程中耗散与内能的关系. 也就是说, 不同 PDE 模型隐含的最小尺度 l_{PDE} 不同. NS 方程基于连续介质假设, 对应宏观耗散尺度 η , 而 Boltzmann 方程从介观角度

描述流体运动, 对应最小尺度则是分子的平均自由程 λ . 在时间方向也存在类似的尺度问题, 这里不再赘述. 需要注意的是, 当物理模型由微分方程来描述后, 数学意义上的最小可分辨尺度变成了无限小(零). 如果采用离散模型, 则最小可分辨尺度对应于离散尺度. 换句话说, 物理模型表现出的性质会受到描述方式的限制.

在 CFD 计算中, 数值离散本身将引入一个新的最小可分辨尺度, 即网格尺度 Δx . 小于网格尺度的流动变化同样只能通过(数值)模型来表达. 最小尺度的差异决定了数值解、物理解 and 偏微分方程的解析解之间存在差异. 为了准确捕捉最小尺度为 l 的流场脉动, 网格尺度必须满足 $\Delta x < l$. 对直接离散 PDE 而建立的传统 CFD 方法, 还必须要求 PDE 隐含的物理模型最小尺度 $l_{\text{PDE}} \ll l$. 对于多尺度流动问题, 一个优秀的 CFD 方法应该能按实际需要自动而高效地刻画出相应尺度上的流动特征. 也就是说, 如果实际应用要求给出小尺度上的流动, 在满足要求的网格尺度上, 数值方法能捕捉到该小尺度上的物理量; 如果只要求给出较大尺度上的流动特征, 数值方法也能在相应较粗的网格上给出合理的流场物理量. 当然, 一个比较直观的想法是以流动的最小尺度来布置计算网格, 从而能将大大小小的各种不同尺度的流场脉动同时捕捉出来. 不过, 如高雷诺数湍流的直接数值模拟(DNS)一样, 这种方法可能需要极其巨大的计算资源, 甚至根本不可行. 实际上, 科学研究的目的是对自然的最有效的描述, 如果所有真实的描述都要归结为最细致的描述, 那么世界上除了粒子物理之外就没有其他科学了.

上面提到的采用不同尺度网格计算得到的流场物理量之间的关系中, “合理”是指采用粗网格得到的单元内物理量应该与采用细网格得到的流场按粗网格尺度平均后得到的平均量近似相同. 同时, 为捕捉边界条件等大尺度因素的影响, 网格的尺度必须足够小. 因此, 随着计算网格的逐步加密, CFD 计算得到的流场平均量应该趋于定值, 这就是网格收敛性. 需要注意的是, 这里的网格收敛性与传统 CFD 计算中的提法不同. 后者通常是指随着网格加密, 数值解逐渐趋近于 PDE 的解析解; 而前者是指数值解与物理解的逼近程度随网格尺度的变化, 包含了不同尺度下 PDE 本身对真实流动的逼近程度. 比如, 如果网格大小和分子直径相近, CFD 应该可以看到独立的

分子; 如果网格尺度在分子平均自由程附近, 看到的就是分子之间的运动和碰撞; 如果网格尺度接近宏观耗散尺度, 看到的就是大量分子的集体效应, 像流体的传输和压力波的传播.

总之, 计算流体力学的根本目的不是去解特定的 PDE 方程, 而是对真实流体流动在不同网格尺度上的直接刻画. 或者说如果用一个连续变化的尺度来观测流体运动, 自然界不可能只有现在孤立的 PDE 方程, 像 NS, Boltzmann 等, 而应该是一个连续谱. 本文的目的就是用直接计算建模的方法来捕捉这样一个物理上连续变化的流体描述或 PDE 方程.

3 基于直接离散 PDE 的 CFD 方法

传统 CFD 方法是通过直接离散描述流体运动的偏微分方程建立起来的. 借助偏微分方程数值解理论, 对简单流动, 特别是具有线性变化特征的流动, 可以比较容易地对 CFD 方法的基本性质, 如稳定性和收敛性等进行理论分析. 实际计算中, 可以根据需要通过加密网格, 从而更好地逼近 PDE 的解析解. 此时, 数值解对物理解的逼近问题实际上是要解的 PDE 对真实流动的近似问题. 这里的理念(原理)实际和计算关系不大, 更像牛顿发明微积分用小单元取极限描述连续曲线一样. 但实际的计算一定是在有限网格大小上进行的, 所以传统的 CFD 方法得到的只是相应 PDE 的一个近似解, 而且在理论上通常也不可能知道在数值上求解的确切方程.

对于多尺度流动问题, 上述方法存在的不足就更加明显. 其一, 对于非线性问题, 基于直接离散 PDE 的数值格式的理论分析非常困难, 至少到目前为止, 仍亟需分析方法的突破. 其二, 对于流动的不同尺度, 需要求解不同的 PDE, 对应的数值方法也可能完全不同, 其间的切换和搭接非常困难. 其三, 对于某些尺度上的流动, 难以建立起有效的宏观输运方程, 就更谈不上数值求解了. 从连续到稀薄这种跨流域多尺度流动就是其中最为典型的例子. 实际上现存的大多数跨尺度计算方法采用的是直接分辨不切实际的最小尺度, 即所谓的蛮力方法.

跨流域流动主要出现在微机电系统(MEMS)和航天气动领域. 近年来近空间飞行器研究的迅猛发展更是对跨流域流动模拟提出了迫切的要求. 无论是飞船从太空(如 100 km 以上)返回地面还是飞行器

从地面运行到太空, 都经历了包括稠密和稀薄大气环境的变化, 给数值模拟带来了极大的困难. 根据飞行器的大小和飞行高度估算出流动的稀薄程度(用 Knudsen 数表示 $Kn = \lambda/L$, L 为流动的特征长度), 对飞行器面临的流态进行划分. 当 $Kn < 0.001$ 时采用 NS 方程求解; 而当 $0.001 < Kn < 0.1$ 时也采用 NS 方程来近似, 同时还需要考虑飞行器表面的速度滑移和温度跳跃. 对于更高 Knudsen 数的区域, 目前还未找到有效的宏观方程, 因而必须采用基于粒子的直接模拟 Monte Carlo 方法(DSMC)^[7]. DSMC 方法完全基于单一尺度(分子平均自由程)来描述流体的运动. 实际上, 对于同一飞行高度, 飞行器的不同部位同样可能面临不同的流态, 因而同样需要进行分区, 从而采用不同的方法求解. 这就需要在不同求解方法之间进行切换, 并且界面上不同方法得到的数据如何交换也是一个非常值得研究的问题. 近年来航空航天领域关心的近空间飞行器(20–100 km 之间)正是要在跨流域中长时间飞行.

从理论上讲, 适合从连续到稀薄跨流域流动的 PDE 是存在的, 那就是 Boltzmann 方程及其简化模型方程. Boltzmann 方程本身的模型尺度是和 DSMC 的尺度是一样的, 即分子的平均自由程. 通常说 Boltzmann 方程适合于所有尺度, 隐含的也是用蛮力的意思, 在所有区域分辨出最小尺度. 这在绝大多数实际应用中基本上是不可能的. 再有, 从 Boltzmann 方程出发通过不同的渐近展开可以得到不同的宏观方程. 通过一阶 Chapman-Enskog 展开得到 NS 方程是一个成功的例子, 但在历史上还得到了很多不太成功的方程, 比如更高阶的 Burnett 和 Super-Burnett 方程. 所以 Boltzmann 方程只是在其模型尺度上描述流动, 本身并没有对其他尺度的适应性. 在数值上发展一种跨尺度的格式比写出 Boltzmann 方程更困难.

对一维单原子气体流动, Boltzmann 方程可以写为

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} = Q(f, f). \quad (1)$$

这里 $f=f(u, v, w, x, t)$ 是速度分布函数, 是气体分子在空间 x , 时间 t 上以速度 (u, v, w) 出现的几率. Q 是分子碰撞产生的源项, 是一个复杂的积分项. 由于分子碰撞过程中保持质量、动量和能量的守恒, 因而有相容性条件,

$$\int Q \psi \, du \, dv \, dw = 0. \quad (2)$$

其中矩矢量

$$\boldsymbol{\Psi} = (1, u, (u^2 + v^2 + w^2)/2)^T. \quad (3)$$

已知分布函数后, 宏观守恒量 \mathbf{W} 及其沿 x 方向的通量 \mathbf{F} 和热流 q 可以通过相空间内的积分(取矩)得到

$$\mathbf{W} \equiv (\rho, \rho u, \rho E)^T = \int f \boldsymbol{\Psi} \, du \, dv \, dw. \quad (4)$$

$$\mathbf{F} = \int u f \boldsymbol{\Psi} \, du \, dv \, dw. \quad (5)$$

$$q = \frac{1}{2} \int (u-U) [(u-U)^2 + v^2 + w^2] f \, du \, dv \, dw. \quad (6)$$

由于针对微分-积分方程的数值求解理论目前很不成熟, 一般采用算子分裂方法, 将方程(1)改写为

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial f}{\partial t} = Q. \end{cases} \quad (7)$$

从而可以采用已有数值方法分步求解. 直接求解方法无论在理论研究还是工程应用领域都已经得到了较好的应用^[8,9]. 值得注意的是, 上述分裂过程实际上将气体分子的自由运动与相互碰撞进行了解耦, 即自由运动时不考虑碰撞, 而碰撞时不考虑自由运动. 从理论上讲, 解耦处理对应的物理过程只在网格尺寸小于分子平均自由程才能严格成立. 在稀薄气体领域, 分子平均自由程与网格尺寸相当是可以做到的. 而在近连续流区, 如此密集的网格对当前计算机资源而言是难以承受的. 如果采用较粗的网格, 比如网格尺度为几百个分子的平均自由程, 从物理上讲, 气体分子不可能在无碰撞的情况下从一个网格移动到另一个网格. 实际上, 按解耦算法进行数值离散, 等效的气体分子平均自由程与网格尺度相近, 因而不可能得到合理的结果. 这实际上反映了在单一尺度上描述流动的限制性.

可以证明, DSMC 方法与求解 Boltzmann 方程等价, 但同样是将分子的自由运动和碰撞解耦计算, 因此在近连续流区也会面临计算量极其巨大的挑战. 另外, 在低速稀薄流动中, 为克服分子热运动导致的噪声, DSMC 方法需要的统计样本非常大, 从而使得计算量进一步增大. 这也正是当前的工程实际应用中, 多采用分区求解的主要原因. DSMC 方法实际上也是对真实气体的直接建模, 但它的模型是在单一

尺度上的.

在逼近基于连续介质假设的 Euler 方程时, 有两个极限物理过程来描述流体运动. 用基于无碰撞的分子自由运动来计算网格界面上的通量, 对应矢量通量分裂方法(KFVS). 由于数值稳定性的限制, 使得每个时间步内分子自由运动的距离不能超过一个网格, 因此隐含的平均自由程是网格尺度, 从而使得数值黏性与网格尺度成正比. 另外一个极限是 Euler 方程的 Riemann 解. 它给出了网格界面上初始间断的演化, 是现代可压缩流动 CFD 格式的基础, 对应于气体分子经过无穷多的碰撞从而产生复杂的波系结构. 从物理上看, 初始间断的演化在有限的时间内是一个典型的非平衡过程, 对应气体分子间的碰撞经历了从无($t \ll \tau$)到逐渐增多($t \sim \tau$), 直至趋近于无穷(足够多($t \gg \tau$))的变化, 这里的 τ 是平均碰撞时间. 在数值离散空间, 由于数值激波厚度只能有网格大小的尺度, 它可能比物理尺度(或真实的激波宽度)大得多, 因而真正在数值上有效的分子平均碰撞时间要对应地加大. 然而在 Riemann 解中隐含的分子平均碰撞时间等于零, 它和物理(或数值)过程要求的差异使其在数值格式中引入的数值耗散不恒定, 结果是在高马赫数流动计算中可能出现 carbuncle 现象^[10,11]. 我们也可以把 Riemann 解看成是对真实气体运动的直接建模, 但它的假设是分子间有无穷多的碰撞, 随时达到平衡态, 这显然不能正确描述处于强非平衡态的数值激波结构. 所以在某种意义上说 Riemann 解对流体物理的描述的分辨率很低, 它没有对真实气体从非平衡到平衡流动的动态刻画. 实际上, 当前 CFD 中应用得更为广泛的不是精确 Riemann 解, 而是近似 Riemann 求解器, 如 HLLC、HLLC 等. 虽然其出发点主要是为了减少计算量, 但它也给了我们更多的自由空间, 算法构造的物理模型已经不再受限制于 Euler 方程了. 从这个意义上看, 现在的算法研究已经超出了 Euler 方程所描述的物理机理. 紧随 Euler 方程的精确 Riemann 解只会限制 CFD 的进一步发展. 另外, 这也从一个侧面反映了在离散空间里数值求解不同于解析求解的复杂性: 通过直接离散 PDE 建立起来的数值方法可能和在数值空间中所能允许的物理过程不匹配, 就像精确 Riemann 解在高马赫数下导致激波不稳定性一样.

总之, 通过直接离散 PDE 的方法来求解跨流域多尺度问题时, 无论是采用分区求解不同模型方程

还是直接求解 Boltzmann 方程, 都面临诸多困难. 主要原因是网格尺度和方程的模型尺度的不匹配. 要得到一个跨尺度的计算方法, 关键在于构建一个在网格尺度上的合理的物理模型, 来耦合考虑该尺度上分子自由运动和碰撞的影响.

4 离散空间直接建模的 CFD 方法

如果不再从偏微分方程的直接离散出发, 如何构建多尺度流动的数值求解方法? 答案需要从流动的物理规律中寻找.

流动过程中最基本的规律是质量、动量和能量的守恒. 在数值离散后的有限分辨率空间, 这些守恒定律仍然成立. 为此可以采用有限体积法. 于是问题就转化为如何计算穿过网格单元界面上的数值通量(演化步), 从而可以计算一个时间步内网格平均量的变化(投影步). 这就需要按一定的形式由网格平均量重构出物理量在单元内的分布, 并且需要建立合适的物理模型来描述界面上重构初始流场的演化. 为简化起见, 可以采用线性重构. 这些实际上是有限体积法的基本步骤, 还未涉及什么新内容. 因此, 为构造适合多尺度流动的 CFD 格式, 界面上的演化模型就显得至关重要.

为求解多尺度流动, 演化模型必须既能描述大尺度流动结构的演化, 同时也能描述小尺度结构的发展. 因此, 采用更为基本的物理模型看起来是一个必须的选择. 考虑到计算效率, 基于 PDE 的演化解显然比基于粒子的物理模型更有优势. 因为演化解本身可以是一个对流体运动的跨尺度描述.

另外, 从计算效率的来看, 该演化模型应该是对气体运动的有效描述, 且易于计算, 否则就如前述 Boltzmann 方程的直接求解一样, 需要分辨到分子平均自由程. 这对计算资源的需求过高, 从而失去了对多尺度问题高效求解的意义. 如果该 PDE 具有解析解或者直接构造出满足物理规律的演化解, 就能完美地解决这个问题. 所有这些取决于此演化解必须是对流体的跨尺度描述.

经典的 Godunov 格式采用 Euler 方程的 Riemann 问题的演化解来描述界面上流动的运动, 从而获得界面上的数值通量. 如前所述, 由于 Riemann 解对应气体分子碰撞次数趋于无穷, 不能描述流动的非平衡演化过程, 也就不能正确反映黏性的影响. 或者说

Riemann 解的尺度(物理模型的分辨率)过大, 它对真实气体运动描述太粗糙. 同时, 对多维问题, Riemann 解的构造仍然是一个富有挑战性的研究课题.

如果所关心的问题最小尺度是分子的平均自由程, 那么 Boltzmann 方程或 BGK 模型方程^[12]无疑是一个很好的选择. 尤其对于 BGK 形式的方程, 由于直接包含对应于连续流的平衡态, 它反映全流域流动的物理规律更直接. 而且利用零阶和一阶 Chapman-Enskog 展开可以在连续介质区域分别得到 Euler 或 NS 方程, 在近连续流和稀薄气体领域也适用. 一维 BGK 方程可以写为

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{g - f}{\tau}. \quad (8)$$

式中, $\tau = \mu/p$ 是分子平均碰撞时间, g 是平衡态分布,

$$g = \rho(2\pi RT)^{-3/2} e^{-[(u-U)^2 + v^2 + w^2]/(2RT)}. \quad (9)$$

这里 ρ, U, p, T, μ, R 分别为气体的密度、速度、压力、温度、动力黏性系数和气体常数. 方程(8)有解析解,

$$f(x, t, u, v, w) = \frac{1}{\tau} \int_0^t g(x', t', u, v, w) e^{-(t-t')/\tau} dt' + e^{-t/\tau} f_0(x - ut). \quad (10)$$

其中 $x' = x - u(t - t')$ 是分子运动的轨迹, f_0 是初始速度分布函数. 需要说明的是, 由于随时间演化的平衡态分布 g 一般来说是未知的, 上式只是一个形式上的解析解. 但是, 其重要作用在于, 可以用它来构造离散空间上的跨尺度演化解. 实际上, 上述解析解包含了两种不同尺度上的分子运动演化规律, 即右边第一项的宏观流体尺度(Hydrodynamic Scale)和第二项的微观动力学尺度. 针对不同流域(尺度)的流动, 初始速度分布函数有不同的设定方式. 如果只需要模拟连续流区流动, f_0 可以取一阶 Chapman-Enskog 近似; 如果需要模拟稀薄流动, f_0 就应该直接在离散相空间取值, 而不需额外的近似. 下文将以适合跨流域流动的 UGKS 方法对此展开详细的讨论.

方程(10)给出了一个随时间演化的跨尺度解, 利用它构造跨尺度的计算方法是本文想要阐述的重要观点. 它也是统一气体动力学方法(UGKS)区别于其他采用渐进保持(Asymptotic-Preserving, AP)准则构造出的方法^[13]的最主要部分.

与直接离散 PDE 的传统 CFD 方法相比, 上述基于 PDE 演化解的新型数值方法能实现不同尺度上物

理模型的光滑过渡, 避免了某些尺度上无有效 PDE 模型的问题, 并且随着网格尺度的减小, 数值解能直接逼近物理解, 而毋须通过分段(区)的 PDE 来实现间接逼近.

总之, 为高效模拟多尺度流动问题, 可以直接在离散空间, 以守恒定律为基础, 构造合适的物理模型 (PDE), 并利用该模型的演化解实现网格界面流动演化的高效模拟, 从而建立适合多尺度流动问题的新型高效数值方法. 气体动力学模型在其中具有非常诱人的发展潜力.

5 应用举例

这里以基于气体动力学模型的 CFD 方法为例, 来说明上述离散空间直接建模的数值模拟方法. 从介观角度描述流体运动时, 在数值离散空间定义初始时刻的位于空间 x_i , 速度空间 u_k 的网格平均的分布函数为

$$f(x_i, t^n, u_k) \equiv f_{i,k}^n = \frac{1}{\Delta x \Delta u} \int_{\Delta x} \int_{\Delta u} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, t^n, u, v, w) dx du dv dw. \quad (11)$$

这里 Δx 和 Δu 分别为物理空间和速度空间的网格大小. 在一个网格中分子速度分布函数的变化取决于分子之间的碰撞与分子穿过网格界面的数量. 由此可得下一个时刻的分布函数,

$$f_i^{n+1} = f_i^n + \frac{1}{\Delta x_i} \int_{t^n}^{t^{n+1}} (u f_{i-1/2} - u f_{i+1/2}) dt + \frac{1}{\Delta x_i} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Delta x_i} Q(f) dx dt. \quad (12)$$

该方程是严格成立的, 但如何衡量流入的分子数和碰撞作用, 是构造数值计算过程的关键, 只有正确反映了流动演化过程的数值方法才能得到符合客观实际的数值解. 由于 Boltzmann 方程(1)描述的碰撞项太过复杂, 难以得到其方程的演化解. 目前基于演化解的 CFD 方法主要为 Xu 等人发展的基于 BGK 模型(8)式的数值求解方法.

5.1 适用于连续流的 GKS 方法^[14]

对连续流动, 由于宏观介质内的分子碰撞次数很多, 其分布函数偏离平衡态不远, 可以通过一阶 Chapman-Enskog 展开直接构造解析解(10)中与 NS 方

程相对应的速度分布函数(取 $x_{i+1/2}=0, t^n=0$)

$$f_0(x, u) = g^l (1 + a^l x - \tau(a^l u + A^l)) (1 - H[x]) + g^r (1 + a^r x - \tau(a^r u + A^r)) H[x]. \quad (13)$$

$$g(x, t, u) = g_0 (1 + (1 - H[x]) \bar{a}^l x + H[x] \bar{a}^r x + \bar{A} t). \quad (14)$$

其中上标“ l ”和“ r ”分别对应界面两侧的物理量, 上划线“ $\bar{\cdot}$ ”代表平衡态分布. H 为 Heaviside 函数, a, A 分别对应分布函数(也就是宏观物理量)的空间和时间导数

$$a = a_\alpha \psi_\alpha = (\partial g / \partial x) / g, \quad (15)$$

$$A = A_\alpha \psi_\alpha = (\partial g / \partial t) / g.$$

由相容关系(3)可以得到它们之间的关系

$$\langle au + A \rangle \equiv \int \psi (au + A) g_0 du dv dw = 0. \quad (16)$$

利用 BGK 方程的通解(10), 可以直接得到单元界面上的分布函数,

$$f_{i+1/2}(t, u) = (1 - e^{-t/\tau}) g_0 + \tau(t/\tau - 1 + e^{-t/\tau}) \bar{A} g_0 + (\tau(-1 + e^{-t/\tau}) + t e^{-t/\tau}) (\bar{a}^l H[u] + \bar{a}^r (1 - H[u])) u g_0 + e^{-t/\tau} ((1 - (t + \tau) a^l u - \tau A^l) H[u] g^l + (1 - (t + \tau) a^r u - \tau A^r) (1 - H[u]) g^r). \quad (17)$$

进而可以利用公式(12)和(4)计算出下一时刻单元内的宏观守恒量, 其中(12)式右端碰撞源项的积分恒为零. 具体的求解细节参见 Xu 等人过去十多年来发表的多篇文献. 按照这种思路, 还可以比较容易地发展更高阶精度的具有真正多维特性的数值格式^[14,16]. 值得一提的是, 即使对于连续流动, 由于耦合考虑了气体分子在自由运动过程中的碰撞效应, 而且碰撞频率的大小直接影响数值黏性, 可以部分地反映出物理过程中的局部非平衡性(分子自由运动提供的黏性超出了 NS 方程所提供的黏性特性), 由此构建的数值方法在多种黏性流动, 特别是高超声速黏性流动中显示了优异的性能^[17].

图 1 给出了采用适合连续流的 GKS 和传统 CFD 方法计算出的马赫数为 8 的静止激波, 其中后者采用基于精确 Riemann 解的 Godunov 格式求解无黏部分, 采用中心差分计算 NS 方程的黏性项. 从图中可以看到, Godunov 格式得到的结果存在波后振荡. 相比之

下, GKS 得到的激波间断和 Godunov 格式一样陡, 但却没有波后振荡. 为深入理解 GKS 方法能光滑捕捉静止数值激波结构的原因, 图 1 中也给出了数值激波结构里上游侧第一个网格单元两侧界面上用于计算通量的气体分布函数. 如图所示, 在左侧网格界面, 气体处于类似上游来流的状态, 即高速低温的平衡态. 而在右侧界面上, 由于位于激波内部, 气体分子处于双模态分布. 这种双模态分布给出的数值耗散近似模拟出了真实激波层中的非平衡效应. 对 Godunov 格式而言, 由于 Riemann 解中的平衡态假设, 网格两侧界面上应该给出相应的 Maxwell 分布, 用它来描述耗散激波层是有缺陷的. 对高马赫数流动, Godunov 格式中的数值耗散与物理耗散的不相容是出现 carbuncle 现象的主要原因. 因此, 即使对于连续流动, GKS 和 Godunov 方法也具有不同的气体演化机制.

5.2 适用于全流域流动的 UGKS 方法^[18]

为模拟跨流域流动, 需要求解离散速度分布函数, 因而(10)式中的初始分布函数不能通过对 Maxwell 分布函数的展开来获得, 而是可以直接构造,

$$f_0(x, u_k) = (f_{i+1/2,k}^l + \sigma_{i,k} x)(1 - H[x]) + (f_{i+1/2,k}^r + \sigma_{i+1,k} x)H[x]. \quad (18)$$

上式中 $\sigma_{i,k}$ 为分布函数的空间导数. 考虑分子间的碰撞使得分布函数向局部平衡态趋近, 解析解(10)式中右端的积分项可以仍然采用前述连续流区的模型,

从而得到单元界面上分布函数为

$$\begin{aligned} f_{i+1/2}(t, u_k) &= (1 - e^{-t/\tau})g_0 + \tau(t/\tau - 1 + e^{-t/\tau})\bar{A}g_0 \\ &+ (\tau(-1 + e^{-t/\tau}) + t e^{-t/\tau})(\bar{a}^l H[u_k] + \bar{a}^r (1 - H[u_k]))u_k g_0 \\ &+ e^{-t/\tau} \left((f_{i+1/2,k}^l - u_k t \sigma_{i,k}) H[u_k] \right. \\ &\left. + (f_{i+1/2,k}^r - u_k t \sigma_{i+1,k}) (1 - H[u_k]) \right) \\ &\equiv \tilde{g}_{i+1/2,k} + \tilde{f}_{i+1/2,k}. \end{aligned} \quad (19)$$

这里 $\tilde{g}_{i+1/2,k}$ 代表了所有与平衡态 g 有关的量, $\tilde{f}_{i+1/2,k}$ 代表了所有与初始值 f_0 有关的量. 上式给出的界面上的分布函数描述了初始值随时间向平衡态演化的物理过程. 利用它可以计算出通过界面的宏观守恒量的通量, 从而求得下一时刻在网格内部的宏观守恒量. 这样在网格中下一时刻的平衡态分布函数 g^{n+1} 也就知道了. 将界面上的分布函数(19)式代入有限体积公式(12), 可以求得下一时刻网格内的分布函数. 其中右端碰撞源项的积分由 n 和 $n+1$ 时刻的平均值来逼近. 整理以后可以得到更新分布函数的最终表达式

$$\begin{aligned} f_{i,k}^{n+1} &= \left(1 + \frac{\Delta t}{2\tau^{n+1}} \right)^{-1} \left[f_{i,k}^n + \frac{1}{\Delta x_i} \int_0^{\Delta t} (u_k f_{i-1/2,k} - u_k f_{i+1/2,k}) dt \right. \\ &\left. + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{g_{i,k}^{n+1}}{\tau_i^{n+1}} + \frac{g_{i,k}^n - f_{i,k}^n}{\tau_i^n} \right) \right]. \end{aligned} \quad (20)$$

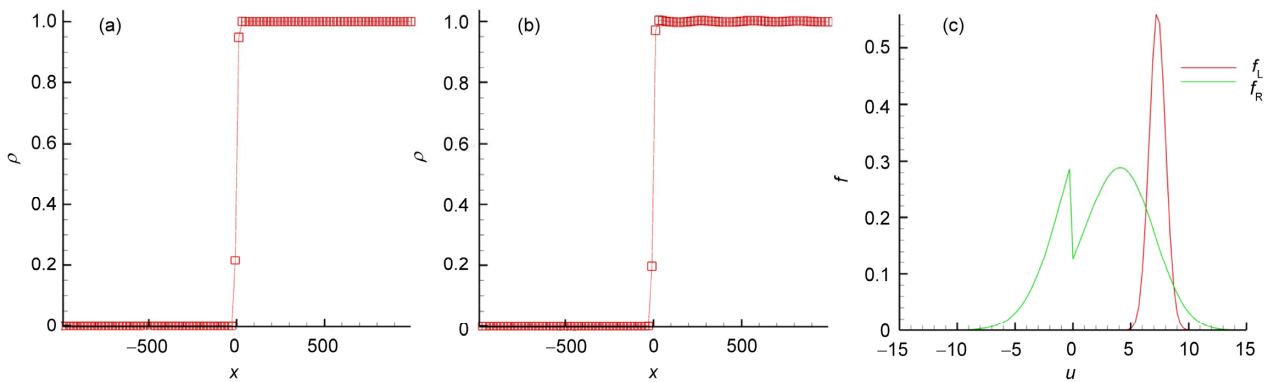


图 1 (网络版彩图)采用 GKS(a)和 Godunov 格式(b)得到的静止激波结构, 以及 GKS 给出的数值激波结构内上游侧第一个网格单元两侧界面上的速度分布函数(c)

Figure 1 (Color online) Stationary shock structure computed with GKS (a) and Godunov scheme (b), and velocity distribution functions at both sides of the first upstream cell inside shock structure simulated with GKS (c).

值得说明的是, 这里的时间步长 Δt 和网格大小 Δx_i 只与流场参数的变化率有关, 而与分子平均自由程无关, 从而保证了 UGKS 可以适用于全流域的高效计算. 之所以能做到这一点, 其根本原因在于, 基于解析解(19)式的分子演化过程没有引入非物理的假定, 分子在自由运动的同时, 也在进行相互碰撞以趋于局部平衡. 在连续介质区域, 碰撞频率高, 故 τ 值很小, (19)式中与平衡态有关的项 $\tilde{g}_{i+1/2,k}$ 起主要的作用. 随着气体稀薄程度越来越高, 碰撞频率越来越低, 故 τ 值越来越大, (19)式中的非平衡项 $\tilde{f}_{i+1/2,k}$ 的作用越来越大直至占主导地位, 反映了气体运动的非平衡效应越来越强.

在上述 UGKS 方法中, 基于离散空间, 利用 BGK 方程的解析解来描述界面上流动的演化, 从而获得穿过界面的数值通量. 由于该解析解中自动耦合了分子的自由运动和相互碰撞, 真正摆脱了传统直接求解 BGK 方程的方法中网格尺度小于分子平均自由程的限制, 适合从连续到稀薄的跨流域流动模拟, 是一种真正意义上的多尺度方法. 这与传统直接离散 PDE 的 CFD 方法有很大的不同. 另外, 与基于粒子的 DSMC 方法相比, UGKS 方法除了网格尺度不受分子平均自由程的限制外, 由于采用了解析解, 获得的流场解比较光滑, 避免了粒子法中对采样样本数量的要求. 这在低速流动中具有巨大的优势.

实践已经证明, 基于离散空间直接建模发展出的跨流域 CFD 方法整个流域内均能取得成功. 连续流求解的可行性已经得到了公认, 现在仅讨论在稀

薄气体范围内的验证情况^[19].

图 2 是采用 UGKS 方法计算得到的平面 Couette 流动的速度和切应力分布, 与其他稀薄气体求解方法如 DSMC 结果和 Sone 的 Boltzmann 方程解非常吻合. 图 3 是 Rayleigh 问题的计算结果, 从稀薄流动直到近连续流, UGKS 计算结果与 DSMC 及解析解(即自由分子流时无碰撞的 Boltzmann 方程的解)十分一致, 且没有 DSMC 计算时存在统计误差的问题.

对多维流动, 可以采用方向分裂方法对 UGKS 进行拓展. 图 4 给出了高超声速圆柱绕流的计算结果. 对于不同稀薄程度的过渡流域($Kn=0.1$, $Kn=1$), 计算结果与 DSMC 符合得很好. 随着 Kn 数的变小, DSMC 方法计算量急剧增大, 而 UGKS 方法则可自动过渡到连续介质方法, 计算量反而可以减小, 体现了其作为全流域计算方法的优点.

为了区别 UGKS 方法和其他基于 Boltzmann 方程的方法, 比如渐进保持的 AP IMEX (Implicit Explicit) 方法(直接利用方程(10)中的 f_0 (即自由分子流)计算网格边界处流量, 其他步骤和 UGKS 一样), 图 5 是它们在模拟 Reynolds 数 1000 方腔流的计算结果^[20]. 结果表明利用单一尺度演化解的 AP IMEX 格式在连续流的计算中数值黏性过大. 自由分子流的演化解对连续流的描述是不精确的.

6 讨论与思考

20 世纪七八十年代捕捉激波的高精度高分辨率

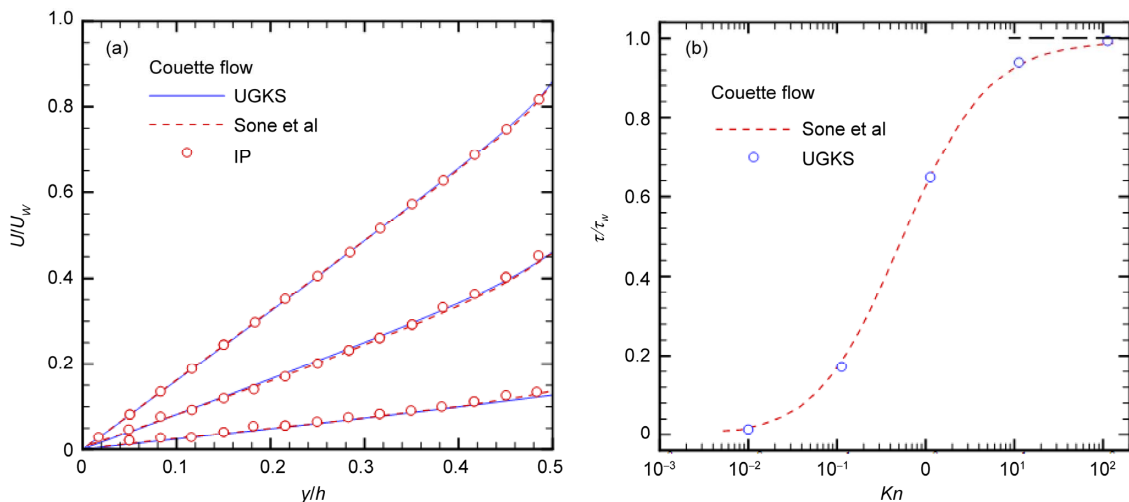


图 2 (网络版彩图)平面 Couette 流动的速度及剪切力分布
Figure 2 (Color online) Velocity and shear stress of planar Couette flow.

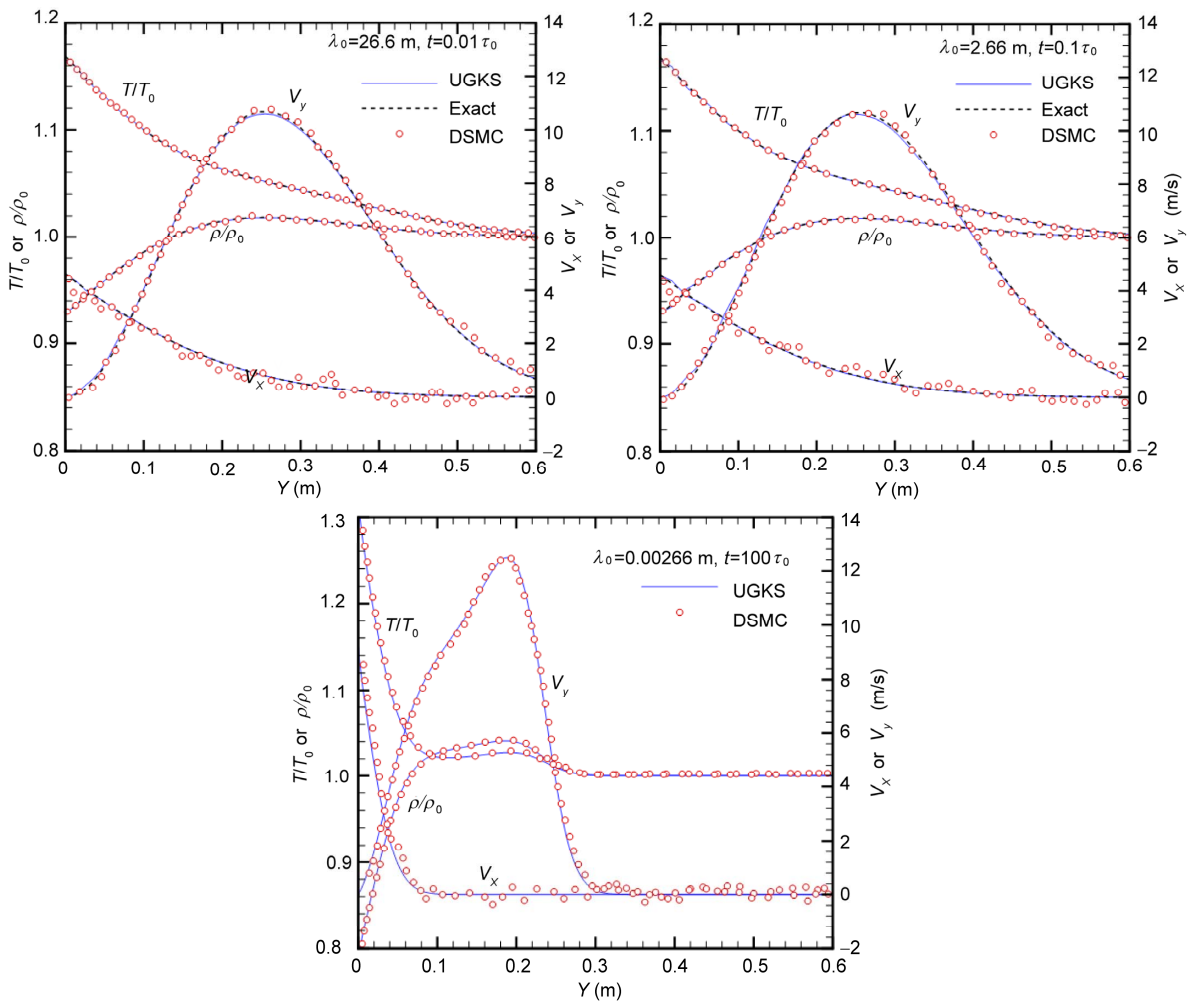


图3 (网络版彩图) Rayleigh 问题的温度、密度及速度分布
 Figure 3 (Color online) Temperature, density and velocity distributions of Rayleigh problem.

格式研究取得突破, 推动了计算流体力学的高速发展. 随着工业应用需求的提高, 流动计算变得日益重要. 但是, 当前计算流体力学方法在高超声速流动和多尺度流动等关键流动问题中面临极大的挑战. 其根本原因在于, 传统 CFD 方法的理论基础主要是偏微分方程数值解理论, 分析 PDE 离散后求解时的存在性、唯一性、相容性、收敛性、稳定性等更多地基于线性偏微分方程理论. 对非线性偏微分方程, 这些理论还远不完备, 因此实际计算中需要较多地依赖使用者的经验. 为发展新一代计算流体力学方法, 亟待思路上的突破.

实际上, 计算流体力学的本质在于客观真实地反映客观实际中的流体运动问题. 如何真实准确地逼近物理过程是计算流体力学数值方法的真谛. PDE

的构造是基于物理模型在一定尺度上对流体运动的描述, 它只适用于其特定尺度. 现有直接离散 PDE 获得数值解的思想并没有跳出传统的微积分思想的范畴, 其目标是通过加密网格(微积分中的极限概念)精确求得 PDE 的解. 由于 PDE 模型本身和计算网格的有限尺度, PDE 直接数值解对真实气体的描述有其局限性. 如果计算是基于有限分辨率的计算空间对流体运动的描述, 那么计算实际上应该是在数值空间里对流体运动的直接刻画. 数值空间中的网格尺度不应该也不可能只有在趋于零的情况下才能对物理的真实性有一个精确描述. PDE 本身是对流体物理在一定尺度上的描述, 具有不同的适用范围. 由于我们完全可以用不同的尺度去描述流体世界, 对自然的描述不可能只限于现有的几组方程, 像 Euler, NS

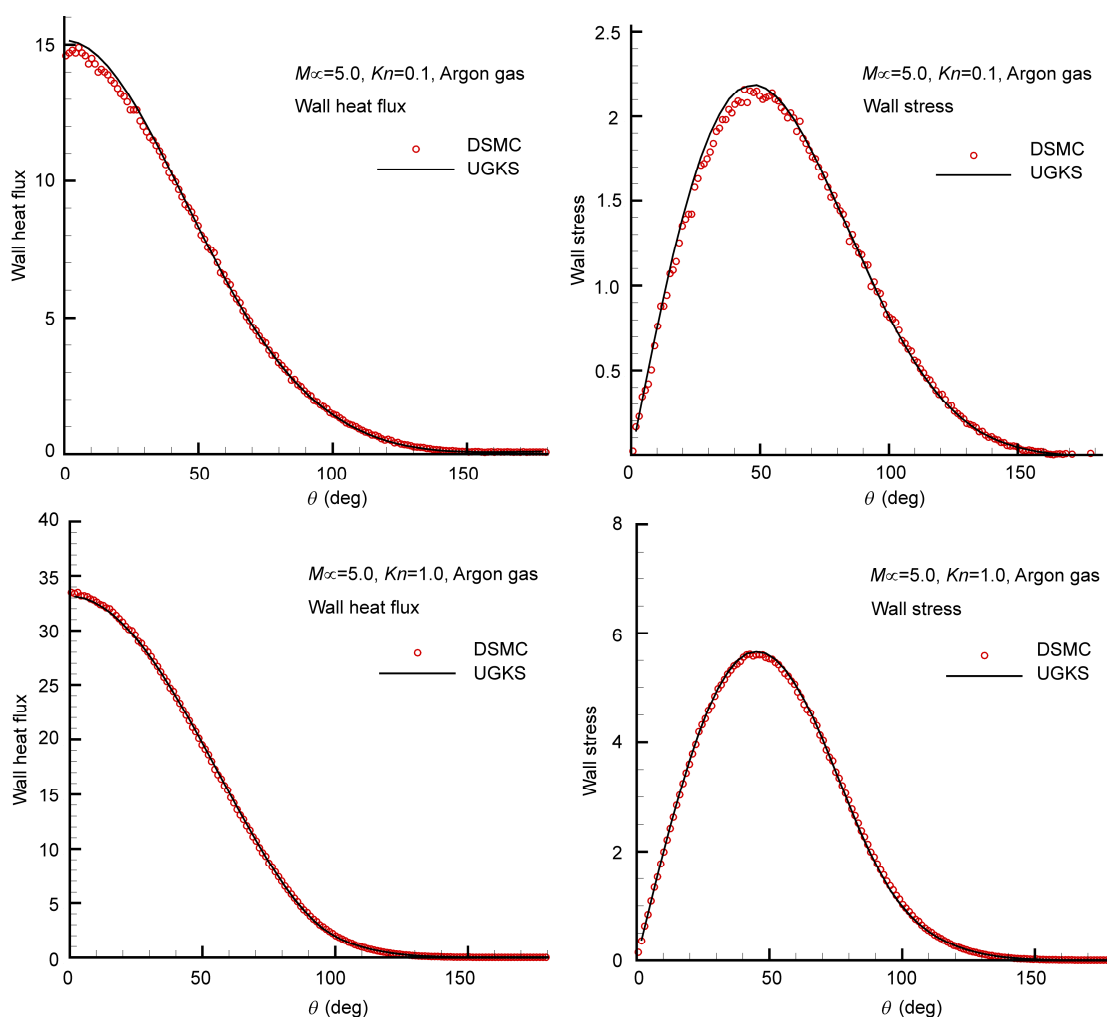


图 4 (网络版彩图) 马赫 5 稀薄气体圆柱绕流中壁面热流及剪切力分布

Figure 4 (Color online) Wall heat flux and shear stress of a cylinder in rarefied gas with Mach number 5.

和 Boltzmann 方程等. 理论上描述流体运动的方程应该是一个具有连续谱的方程, NS 和 Boltzmann 方程只是其中的特例. 在数值空间的直接建模计算为我们提供了建立和模拟连续谱方程的可能性. 因为随着网格的尺度变化, 它所代表的方程或动力学过程不同了. 所以在某种意义上说构造数值格式比写出 PDE 本身更困难, 因为它需要建立起在不同网格尺度上的气体演化过程. 本文所提到的 UGKS 方法是在上述数值计算原理上的一个很好的范例. 对于湍流等其他多尺度流动问题, 直接建模方法也有望发挥重要的作用.

7 小结

本文提出了一种发展多尺度 CFD 格式的全新途

径, 即直接在离散空间, 以守恒定律为基础, 构造合适的物理模型, 利用该模型的跨尺度演化解实现网格界面流动演化的高效模拟, 从而建立起新型数值方法. 以适合连续流动 GKS 方法和适合跨流域流动的 UGKS 方法为例对新途径进行了成功验证.

与直接离散 PDE 的传统做法相比, 基于离散空间直接建模构造出的数值方法耦合考虑了网格尺度和物理模型对数值解与真实多尺度流动之间逼近关系的影响, 能做到不同尺度上物理模型的光滑过渡, 从而实现对多尺度流动的高效模拟.

基于 Boltzmann 偏微分方程的模型演化解涵盖了不同尺度上的流体运动规律, 在离散空间上直接应用它而发展起来的数值方法可以适用于全流域:

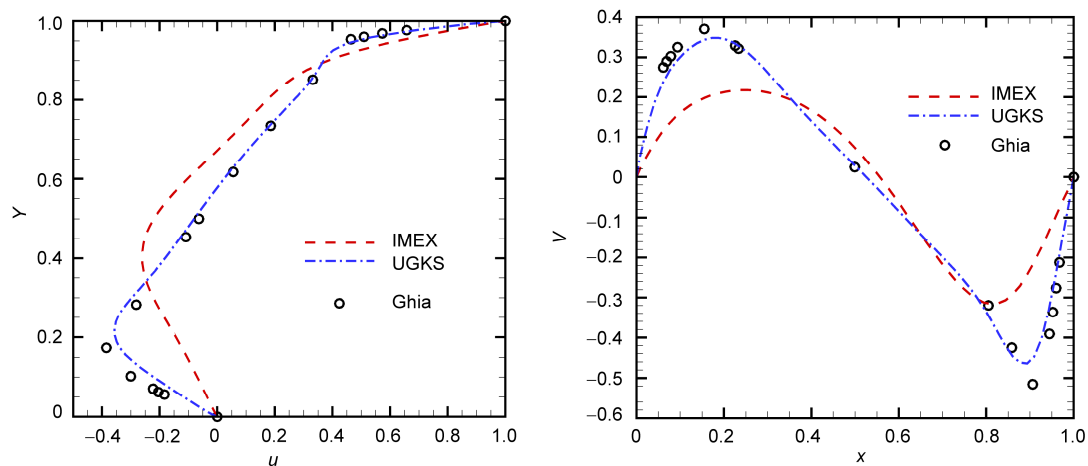


图5 (网络版彩图)方腔流动中的速度分布($Re=1000$, 物理空间网格 61×61)
Figure 5 (Color online) Velocity profiles of cavity flow ($Re=1000$, 61×61 cells in spatial space).

既可在连续介质区域,也可在稀薄气体环境的流动计算中获得符合物理的真实解,这是传统偏微分方程的直接离散解所不能实现的.对于更为复杂的多尺度多物理流体运动和粒子传输,在多数情况下可能还缺乏对应的 PDE,所以在数值空间里的直接建

模和模拟变得更为重要.

多物理、多尺度流动的高效模拟是新一代计算流体力学面临的关键问题.直接在有限数值尺度上构建符合物理规律的计算方法已在这方面显示了巨大的潜力,具有非常诱人的发展前景.

参考文献

- Richardson L F. Weather Prediction by Numerical Process. London: Cambridge University Press. Reprinted, New York: Dover, 1965
- Neumann J V, Richtmyer R D. A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks. *J Appl Phys*, 1950, 21(3): 232–237
- 张涵信, 沈孟育. 计算流体力学-差分方法的原理和应用. 北京: 国防工业出版社, 2003
- 傅德薰, 马延文, 李新亮, 等. 可压缩湍流直接数值模拟. 北京: 科学出版社, 2010
- Yan C, Yu J, Xu J L, et al. On the achievements and prospects for the methods of computational fluid dynamics (in Chinese). *Adv Mech*, 2011, 41(5): 562–589 [阎超, 于剑, 徐晶磊, 等. CFD 模拟方法的发展成就与展望. *力学进展*, 2011, 41(5): 562–589]
- Cercignani C. The Boltzmann Equation and Its Applications. New York: Springer-Verlag, 1988
- Bird G A. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. New York: Oxford Science Publications, 1994
- Aristov V V. Direct Method for Solving the Boltzmann Equation and Study of Nonequilibrium Flows. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 2001
- Li Z H, Zhang H X. Gas-kinetic numerical studies of three-dimensional complex flows on spacecraft re-entry. *J Comput Phys*, 2009, 228(4): 1116–1138
- Xu K, Li Z W. Dissipative mechanism in godunov-type schemes. *Int J Numer Methods Fluids*, 2001, 37(1): 1–22
- Li J Q, Li Q B, Xu K. Comparison of the generalized riemann solver and the gas-kinetic scheme for inviscid compressible flow simulations. *J Comput Phys*, 2011, 230(12): 5080–5099
- Bhatnagar P L, Gross E P, Krook M. A model for collision processes in gases I: Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Phys Rev*, 1954, 94(3): 511–525
- Jin S. Efficient asymptotic-preserving (AP) schemes for some multiscale kinetic equation. *SIAM J Sci Comput*, 1999, 21(2): 441–454
- Xu K. A gas-kinetic BGK scheme for the Navier-Stokes equations and its connection with artificial dissipation and Godunov method. *J Comput Phys*, 2001, 171(1): 289–335
- Li Q B, Xu K, Fu S. A high-order gas-kinetic Navier-Stokes flow solver. *J Comput Phys*, 2010, 229: 6715–6731
- Li Q B, Fu S. High-order accurate gas-kinetic scheme and turbulence simulation (in Chinese). *Sci Sin-Phys Mech Astron*, 2014, 44:

- 278–284 [李启兵, 符松. 高精度气体动理学格式与湍流模拟. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2014, 44: 278–284]
- 17 Li Q B, Xu K. Progress in gas-kinetic scheme (in Chinese). Adv Mech, 2012, 42(5): 522–537 [李启兵, 徐昆. 气体动理学格式研究进展. 力学进展, 2012, 42(5): 522–537]
- 18 Xu K, Huang J C. A unified gas-kinetic scheme for continuum and rarefied flows. J Comput Phys, 2010, 229(20): 7747–7764
- 19 Huang J C, Xu K, Yu P B. A unified gas-kinetic scheme for continuum and rarefied flows II: Multi-dimensional cases. Commun Comput Phys, 2011, 12(3): 662–690
- 20 Chen S Z, Xu K. A comparative study of an asymptotic preserving scheme and unified gas-kinetic scheme in continuum flow limit. 2013, arXiv preprint arXiv:1307.4961

Direct modeling-based computational fluid dynamics

XU Kun^{1,4}, LI QiBing^{2*} & LI ZuoWu³

¹ Department of Mathematics, Hong Kong University of Science and Technology, Hong Kong;

² School of Aerospace, Tsinghua University, Beijing 100084, China;

³ China Aerodynamics Research and Development Center, Mianyang 621000, China;

⁴ State Key Laboratory for Turbulence and Complex Systems, Peking University, Beijing 100871, China

A new principle for constructing CFD scheme for multiscale and multiphysics flow computation is proposed. The principle is about the direct modeling in the discrete space and the use of cross-scale time evolution solution in the construction of numerical method. In comparison with traditional CFD method, where a direct discretization is used for the partial differential equation (PDE), the new numerical methodology takes into account the mesh size effect and its associated evolution solution in the mesh size scale. As a result, with the variation of mesh size with respect to the local particle mean free path, a continuous spectrum of gas evolution model from the kinetic to the hydrodynamic scales can be recovered. For many multiscale flow problems, the governing equations may not be available, but the direct modeling can be still used to simulate different scale gas evolution process. The cross-scale time evolution solution from the model Boltzmann equation plays a central role in the direct modeling. Based on the direct modeling principle, the unified gas-kinetic scheme for the entire Knudsen number flow has been constructed. The excellent performance of the scheme validates the feasibility and advantage of the present CFD principle.

numerical solution of partial differential equation, direct modeling in discrete space, multiscale flow, unified gas-kinetic scheme, BGK equation

PACS: 47.11.-j, 02.60.-x, 51.10.+y, 47.45.-n

doi: 10.1360/SSPMA2013-00054