

气体动理学格式研究进展*

李启兵^{1,†} 徐 昆²

¹ 清华大学航天航空学院, 北京 100084

² 香港科技大学数学系, 香港九龙清水湾

摘 要 介绍了近年来气体动理学格式 (gas-kinetic scheme, GKS, 亦简称 BGK 格式) 的主要研究进展, 重点是高阶精度动理学格式及适合从连续流到稀薄流全流域的统一动理学格式. 通过对速度分布函数的高阶展开和对初值的高阶重构, 构造了时间和空间均为三阶精度的气体动理学格式. 研究表明, 相比于传统的基于 Riemann 解的高阶格式, 新格式不仅考虑了网格单元界面上物理量的高阶重构, 而且在初始场的演化阶段耦合了流体的对流和黏性扩散, 也能够保证解的高阶精度. 该研究为高精度计算流体力学 (computational fluid dynamics, CFD) 格式的建立提供了一条新的途径. 通过分子离散速度空间直接求解 Boltzmann 模型方程, 在每个时间步长内将宏观量的更新和微观气体分布函数的更新紧密地耦合在一起, 建立了适合任意 Knudsen (kn) 数的统一格式, 相比于已有的直接离散格式具有更高的求解效率. 最后, 本文还讨论了合理的物理模型对数值方法的重要性. 气体动理学方法的良好性能来自于 Boltzmann 模型方程对计算网格单元界面上初始间断的时间演化的准确描述. 气体自由运动与碰撞过程的耦合是十分必要的. 通过分析数值激波层内的耗散机制, 我们认识到采用 Euler 方程的精确 Riemann 解作为现代可压缩 CFD 方法的基础具有根本的缺陷, 高马赫数下的激波失稳现象不可避免. 气体动理学格式为构造数值激波结构提供了一个重要的可供参考的物理机制.

关键词 气体动理论, 高精度动理学格式, 统一动理学格式, BGK 方程

1 引 言

现代航空航天技术的飞速发展, 要求对高速飞行器面临的复杂流场进行越来越细致的时空刻画, 在这方面高分辨率、高精度格式日益显示出其独有的优势^[1-8]. 高精度有限体积格式由于能保证流场中物理量的守恒性, 且能适用于飞行器面临的复杂网格系统, 近年来逐渐成为计算流体力学的研究热点. 有限体积方法包括单元内物理量的重构、单元界面上重构出的初始物理量随时间的演化以获得数值通量、通过界面通量计算单元内空间平均值的投影 3 个步骤. 大量研究工作集中在高阶重构上, 而对初值演化模型的研究非常少. 事实上, 高阶格式不仅需要高阶精度的重构, 更需要高阶精度的气体演化模式. 后者与选取的模型方程直接相关.

对传统直接基于宏观守恒量的格式而言, Euler 方程的 Riemann 解 (及其近似解) 是演化步的核心. 以此为基础, 国内外研究学者发展出了众多的计算流体力学方法, 在越来越多的领域取得了成功应用, 有力地推动了相关学科和工业应用的发展. 应用的发展反过来也对数值方法提出了越来越高的要求, 迫切需要开展更为深入的基础研究. 其中, 一个经常被人忽视的问题是, 由于宏观方程的强非线性, 用其描述界面上初始间断的演化在理论上存在先天的不足. 由于 Riemann 解在时间方向上为一阶精度 (generalized Riemann problem, GRP 求解器^[9] 可达到二阶), 需要结合多步 Runge-Kutta 方法提高时间精度. 通过 Runge-Kutta (NS) 积分过程中的空间重构子步, 能缓解一阶 Riemann 解在动力学上的不足. 由于其中空间和时间的解耦, 这种处理似乎弱化了原始非线性

收稿日期: 2011-10-28, 修回日期: 2012-06-08 doi: 10.6052/1000-0992-11-149

* 国家自然科学基金项目 (10872112, 11172154) 资助, 香港大学教育资助委员会 (621709, 621011) 资助

† E-mail: lqb@tsinghua.edu.cn, makxu@ust.hk

性控制方程中的时-空演化的强耦合作用. 构造基于分段连续高阶重构初值的直接 Navier-Stokes (NS) 通量函数就成了发展高阶格式面临的一个关键问题. 然而, 由于初始间断的存在, 分段连续初值和 Navier-Stokes (NS) 方程的双曲-抛物性质在数学上似乎并不相容, 如初始间断导致的黏性项和热传导项的歧义问题. 当然, 在实际数值计算中, 黏性和热传导一般通过中心差分直接计算, 隐含了速度和温度场在界面处连续分布的假设. 也就是说, 离散对流项时初始重构场是间断的, 而在离散黏性项时又假设其是连续的. 这种常用处理方法带来的相容性问题, 其对计算结果的影响究竟有多大? 在多大程度上能通过更为精巧的重构和时间积分方法得到弥补? 从数值耗散的角度看, 重构、演化和投影步均能导致 (正/逆) 耗散. 如何引入合理 (相容) 的耗散就成了一个关键的问题. 对高超声速黏性流动这样的存在强间断的流动而言, 如何减少数值黏性对物理黏性的干扰, 同时又能保持计算的稳定, 长期以来一直是一个亟待解决的难题. 例如, 实际计算中经常遇到的 carbuncle 现象就是其中一个典型代表. 另外, 由于缺乏真正的多维 Riemann 求解器, 难以构造真正的多维格式. 常用的方法是在单元界面上采用多个积分点来近似.

近年来发展起来的基于微观气体动理论¹的数值方法, 为构造高精度求解器提供了一条新的途径. 气体动理学格式 GKS^[10-12] 就是其中的典型代表. 它自动满足熵条件, 具有较好的稳健性和低密度计算中的保正性. 可以证明, 在物理量连续变化的条件下, 该方法等价于 (NS) 方程; 而对于流场间断, 它同时考虑了气体的自由运动和之间的相互碰撞, 因此可以自动引入随时间变化的相容的黏性或者数值耗散. 其理论基础是 Boltzmann 方程并不需要初值的光滑性. 当初始流动为不连续流时, 在大于平均碰撞时间的尺度上, 动力学方程本身包含了构造耗散激波结构的机制. 与 GRP 相比, 在描述单元界面上重构初值的演化时, 气体动理学格式采用了不同的物理机制, 从而为在离散时间和空间中捕捉非平衡激波过渡层 (跨越几个网格的数值激波) 提供了更为坚实的基础.

同时, 由于分布函数中包含了各个方向的微观速度分布, 本质上具有多维特性, 因此也很容易构造真正的多维格式. 另外, GKS 中每个时间步上物理量的计算仅与周围几层网格点有关, 时间

方向直接显式积分推进, 具有良好的局域性, 很容易采用并行计算技术, 从而对非定常流动模拟所面临的大规模计算非常有利.

本文将首先概述气体动理学格式的基本原理以及近年来格式的研究现状, 然后重点介绍高阶精度格式和适合任意 Kn 数的统一算法的构造方法, 并在此基础上探讨合理的物理模型对数值方法的影响. CFD 领域经过半个世纪的发展, 已经取得了长足的进步, 大多数工程师已仅仅满足于使用商业软件或应用已有方法. 我们希望通过这篇文章引发对现代 CFD 基础的一些思考, 从而推动 CFD 从当前的更多的基于 ‘艺术’ 的研究向未来的基于科学的方向的转变.

2 GKS 的基本原理

描述气体的运动可以有两种途径. 第一种是从宏观角度出发, 利用守恒定律, 结合流体的应力-应变、热流-温度梯度等本构关系, 建立宏观物理量所满足的控制方程, 如 Euler 方程和 NS 方程; 第二种是从微观气体运动出发, 结合气体分子 (或粒子) 间的碰撞模型, 建立速度分布函数所遵循的控制方程, 如 Boltzmann 方程. 后者就是统计力学, 或者气体动理论的研究范畴. 两种描述途径之间可以通过对分布函数在相空间的积分, 并借助 Chapman-Enskog 展开联系起来.

由于 Boltzmann 方程的复杂性, 实际中用得最多的是由 Bhatnagar, Gross 和 Krook 于 1954 年提出的 BGK 模型方程^[13]. 其核心思想是速度分布函数在平衡态附近回到平衡态的速率与偏离平衡态的大小成正比. 半个多世纪以来的研究表明, BGK 模型的应用范围已经远远超出了 Boltzmann 方程本身, 如可以不限于稀疏气体假设. 这得益于模型中包含的松弛过程在很多领域和真实的物理过程有着紧密的联系. 传统 BGK 方程中分子平均碰撞时间为常数, 而以下讨论的 BGK 方程及格式的分子碰撞时间是空间和时间的函数.

在无外力场作用的情况下, 三维 BGK 方程可以写成

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} = \frac{g - f}{\tau} \quad (1)$$

其中, 气体分布函数 $f = f(\mathbf{x}, t, \mathbf{u}, \boldsymbol{\xi})$ 是气体在空间 \mathbf{x} , 时间 t 上以速度 \mathbf{u} 和内自由度 $\boldsymbol{\xi}$ 出现的几率. τ 为平均碰撞时间, 与黏性系数和压力的关系可以写成 $\tau = \mu/p$. 平衡态分布函数 g 为 Maxwell 分布

$$g = \rho(\lambda/\pi)^{(K+3)/2} e^{-\lambda[(\mathbf{u}-\mathbf{U})^2 + \boldsymbol{\xi}^2]} \quad (2)$$

¹ Gas-kinetic theory, 亦称气体分子运动论, 1989 年物理学名词审定委员会定名为气体动 (理学) 理论.

式中, $\xi^2 = \xi_1^2 + \dots + \xi_K^2$, $K = (5 - 3\gamma)/(\gamma - 1)$ 为内部自由度, $\lambda = 1/(2RT)$. 由于在碰撞过程中, 分子总的质量、动量和能量不变, 所以应当有相容性条件

$$\int \psi_\alpha (f - g) d\Xi = 0, \quad \alpha = 1 \sim 5 \quad (3)$$

其中, 相空间微元 $d\Xi = d\mathbf{u}d\boldsymbol{\xi}$, 而矩矢量

$$\boldsymbol{\psi} = [1, \mathbf{u}, (\mathbf{u}^2 + \boldsymbol{\xi}^2)/2]^T \quad (4)$$

宏观守恒量 \mathbf{Q} 及其沿 x_m 方向的通量 \mathbf{F}_m 和热流 q_m 可以通过相空间内的积分 (取矩) 得到

$$\mathbf{Q} = (\rho \quad \rho\mathbf{U} \quad \rho E)^T = \int f \boldsymbol{\psi} d\Xi \quad (5)$$

$$\mathbf{F}_m = \int u_m f \boldsymbol{\psi} d\Xi \quad (6)$$

$$q_m = \frac{1}{2} \int (u_m - U_m)[(\mathbf{u} - \mathbf{U})^2 + \boldsymbol{\xi}^2] f d\Xi \quad (7)$$

现在的问题就是如何求解 BGK 方程 (1), 进而获得流场的所有信息. 最直接的方法就是在高维相空间里直接离散求解 BGK 方程. 当然, 考虑到微观速度 \mathbf{u} 的取值为 $(-\infty, +\infty)$, 离散的时候需要一定的特殊处理, 如离散坐标法 (discrete velocity method, DVM)、统一算法 [14-16] 等. 这种方法的优势是从理论上讲可以求解任意 Kn 数的流动, 不足的是计算量很大. 格子 Boltzmann 方法 (lattice Boltzmann method, LBM) [17] 采用类似的处理, 用离散的格子速度来代替连续的速度分布, 进而得到空间离散点上的近似分布函数. LBM 在近不可压缩流动中得到了广泛的研究.

另外一种求解思路就是采用有限体积法, 通过近似求解分布函数来计算网格单元界面上的数值通量, 进而得到下一时刻的流场信息. 由式 (1) 和式 (3) 可建立有限体积法的计算公式

$$(\mathbf{Q}^*)_{ijk}^{n+1} = (\mathbf{Q}^*)_{ijk}^n + \frac{1}{V_{ijk}} \oint_{S_{ijk}} \int_{t^n}^{t^n + \Delta t} \mathbf{F}^* dt d\mathbf{S} \quad (8)$$

其中 “*” 代表全局坐标. 全局坐标中的通量 \mathbf{F}^* 可以通过坐标转换由单元界面上的局部坐标系中的通量 \mathbf{F} 计算得到

$$\mathbf{F}^* = (F_1, n_{1\beta} F_\beta, n_{2\beta} F_\beta, n_{3\beta} F_\beta, F_5)^T, \quad \beta = 2, 3, 4 \quad (9)$$

当然, 问题的关键还是如何得到分布函数. 我们已经知道, 若平均碰撞时间 τ 在单元内为常数, 则方

程 (1) 有如下形式的通解

$$f(\mathbf{x}, t, \mathbf{u}, \boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{\tau} \int_0^t g(\mathbf{x}', t', \mathbf{u}, \boldsymbol{\xi}) e^{-(t-t')/\tau} dt' + e^{-t/\tau} f_0(\mathbf{x} - \mathbf{u}t) \quad (10)$$

其中, f_0 为 $t=0$ 时的分布函数, $\mathbf{x}' = \mathbf{x} - \mathbf{u}(t-t')$, 为分子运动的轨迹. 上述通解得益于 BGK 方程从高维空间中描述流体运动, 从而关于气体速度分布函数的控制方程在形式上是线性的. 右端两项分别反映了分子间的相互碰撞和自由运动对分布函数的影响. 值得注意的是, 这两种影响是非线性相互耦合的. 如果已知初始分布函数 f_0 和平衡态分布 g , 则可由式 (10) 直接得到随时间变化的分布函数 f . f_0 和 g 可以根据需要逼近的流动特征通过宏观物理量加以构造. 这样建立的格式至少有两个优点. 第一, 流场信息通过宏观量加以记录和更新, 传统直接基于宏观量的数值方法中的不少有效处理手段, 如单元内物理量的重构、边界条件、定常流动中的加速技术等可以直接应用; 第二, 这种格式的计算量和存储量与传统方法相当, 远远小于直接求解 BGK 方程的开销.

GKS 就采用了这种巧妙的思路. 其计算过程为: 利用网格单元界面上重构得到的守恒量, 通过 Chapman-Enskog 展开构造出初始分布函数 f_0 和平衡态分布 g , 然后通过通解式 (10) 求出随时间变化的分布函数 f , 再由该分布函数计算出单元界面上的守恒量通量, 最后代入有限体积法公式 (8) 得到下一时间步上的守恒量. 例如, 为逼近 NS 方程, 采用方向分裂技术时, 只考虑分布函数沿界面法向 ($\mathbf{x} = \mathbf{0}$, 法向为 x 方向) 的变化, 该处 f_0 和 g 构造形式如下

$$f_0(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\xi}) = g^l [1 + a^l x - \tau(a^l u + A^l)] \cdot (1 - H[x]) + g^r [1 + a^r x - \tau(a^r u + A^r)] H[x] \quad (11)$$

$$g(\mathbf{x}, t, \mathbf{u}, \boldsymbol{\xi}) = g_0 [1 + (1 - H[x]) \bar{a}^l x + H[x] \bar{a}^r x + \bar{A}t] \quad (12)$$

其中, $H[x]$ 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

$$\left. \begin{aligned} a &= a_\alpha \psi_\alpha = (\partial g / \partial x) / g \\ A &= A_\alpha \psi_\alpha = (\partial g / \partial t) / g \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

由相容关系式 (3) 可以得到它们之间的关系

$$\langle a\mathbf{u} + A \rangle \equiv \int \boldsymbol{\psi}(a\mathbf{u} + A) d\Xi = \mathbf{0} \quad (14)$$

利用 BGK 方程的通解, 单元界面上的分布函数就可以显式表示为

$$f(\mathbf{0}, t, \mathbf{u}, \boldsymbol{\xi}) = (1 - e^{-t/\tau})g_0 + [\tau(-1 + e^{-t/\tau}) + te^{-t/\tau}]\{[\bar{a}^l H(u) + \bar{a}^r(1 - H(u))]u\}g_0 + \tau(t/\tau - 1 + e^{-t/\tau})\bar{A}g_0 + e^{-t/\tau}\{[1 - (t + \tau)a^l u - \tau A^l]H(u)g^l + [1 - (t + \tau)a^r u - \tau A^r](1 - H(u))g^r\} \quad (15)$$

利用宏观守恒量的空间导数可以计算出上式中的各系数, 进而可以算出界面上的通量. 详细计算过程及具体参数定义可见文献 [11-12].

上述格式中每个时间步上物理量的计算仅与周围几层网格点有关, 时间方向直接显式积分推进, 具有良好的局域性, 很容易采用并行计算技术, 从而对非定常流动模拟所面临的大规模计算非常有利. 格式在时间和空间方向都是二阶精度 [18]. 如果利用根据上一时间步的分布函数计算出的界面物理量来参与重构的话, 还可以进一步提高格式的精度, 并且养活重构的模板点 [19]. 有关格式的稳定性, 收敛性等数学性质, 目前已开展的理论研究还非常有限 [20]. 另外, 上述分布函数是 Maxwell 分布的线性组合, 由此取矩计算宏观量的开销也比较小. 这也正是 GKS 的计算量与传统方法相当的原因.

需要说明的是, 原始的 BGK 模型方程描述的流动中 Prandtl 数为 1, 看起来其应用范围受到了极大的限制. 但是, 从数值计算的角度看, 利用分布函数可以直接积分计算单元界面的热流通量 (方程 (7)), 进而对其进行直接修正, 从而得到正确的总能通量. 无论是在有限体积 GKS 还是统一算法的实际应用中都表明了这一修正的 BGK 模型

的有效性. 事实上, Prandtl 数本身反映的就是宏观效应, 从宏观角度直接修正应该是合理的. 有关 Prandtl 数修正的具体方法见文献 [11-12].

格式中考虑了捕捉流场中激波等物理间断, 其中碰撞时间的选取应该考虑到真实的物理黏性和在有限网格分辨率下数值激波的宏观尺度

$$\tau = \frac{\mu}{p} + C\Delta t \frac{|p^l - p^r|}{p^l + p^r}, \quad (16)$$

其中, p^l 和 p^r 分别为单元界面两侧重构出的压力, C 可取 0 到 1 间的常数. 右端第二项中的 Δt 也可以用 $\Delta x\sqrt{\lambda_0}$ 来代替. 对于光滑流动区域, 界面两侧重构出的物理量及其导数相等, $a^l = a^r = \bar{a} = a$, $A^l = A^r = \bar{A} = A$, 上述格式可以得到极大的简化

$$f = g_0 [1 - \tau(au + A) + At] \quad (17)$$

可以严格证明上述分布函数对应于求解 NS 方程的 Chapman-Enskog 展开, 时间部分的演化和 Lax-Wendroff 方法一致, 即通过 Euler 方程求解物理量的时间导数. 另外, 对应用比较广泛的动力学矢量通量分裂格式 (kinetic flux vector splitting, KFVS) [21-24], 不难发现它可以看成是 GKS 的一种简化形式. 它采用无碰撞的 Boltzmann 方程, 其通解中仅包含 $f_0(\mathbf{x} - \mathbf{u}t)$ 这一项, 在平均碰撞时间远大于计算时间步长时可以得到很好的计算结果. 总体来说, BGK 通量是迎风法和中心差分格式的有机融合.

在 GKS 中, 常用的基于宏观量的边界条件可以直接应用. 也可以直接基于速度分布函数给出边界条件. 这样, 近连续流动中固体壁面的速度滑移和温度跳变可以自动获得 [25-26]. 图 1 给出了采用 GKS(BGK-NS) 计算双锥高超声速绕流的结果.

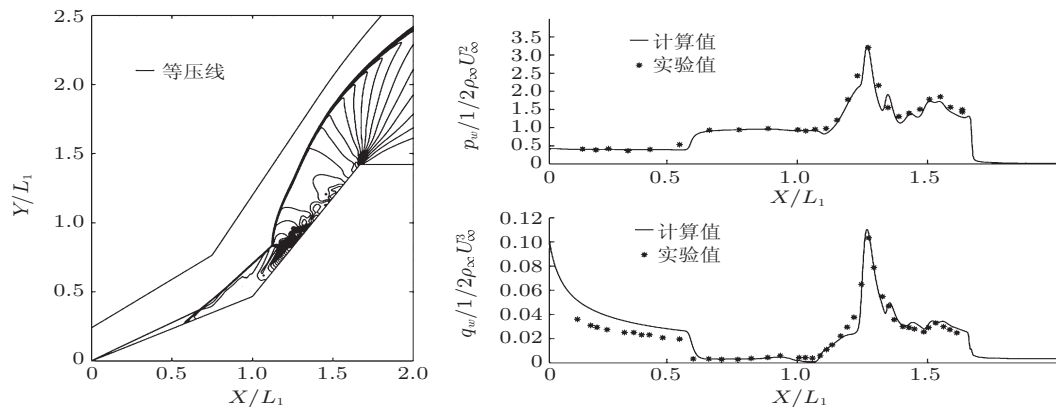


图 1 25°~50° 双锥超声速绕流 ($M = 9.59$) 压力等值线和锥面压力/热流分布 [27]

从图 1 中可以清楚地看出 GKS 对流场的捕捉能力。

采用类似的思路, 可以通过更高一阶的 Chapman-Enskog 展开构造出 f_0 和 g , 从而逼近 Burnett 方程。也可基于一阶 Chapman-Enskog 展开, 利用 Taylor 展开将 f_0 和 g 在时间和空间上做高阶展开, 这样就能构造出逼近 NS 方程的高阶精度的气体动力学格式。

3 GKS 的拓展与应用

由于 GKS 在描述气体初值的发展演化阶段时, 采用的是 BGK 模型方程, 而该方程耦合了的自由运动与相互碰撞, 自动满足熵增原理 (H 定理), 所以不需要讨论熵条件, 同时实际应用中发现该格式具有保正性, 在低密度流动的计算中也不会出现负值。正是这些原因使得该方法得到越来越多的应用。

通过求解不同组分对应的分布函数, 或者通过在分布函数中引入一个内自由度来简化求解多组分流动, 进而可以考虑源项的影响从而模拟化学反应流动^[28-31]。结合汽/水混合物的状态方程, 或者完全气体模型和水的刚性状态方程, 可以建立适合两相流的动力学格式^[32-33]。选取合适的平衡态分布, 由 BGK 方程可以导出浅水方程。这样就可以建立适合浅水流动的气体动力学格式^[34-35]。特别的是, 考虑到重力和底部变化对网格单元界面上通量函数的影响后, 可以建立完全平衡 (well-balanced) 的浅水流动数值方法^[36]。对于受重力影响的可压缩气体流动, 由于密度的变化, 建立完全平衡的数值方法是 CFD 领域的一大挑战。它对于克服像恒星演化这种需要长时间模拟的问题非常重要, 非完全平衡的格式可能导致数值加热, 从而严重影响到温度场的准确模拟。最近研究的一大进展就是建立了真正完全平衡的气体动力学格式^[37]。它引入单元内不变的重力势函数, 通过考虑单元界面两侧动能与势垒的大小来判断分子是否穿过界面, 从而计算出数值通量。这种完全平衡格式的成功建立得益于从高维的气体动理论角度描述流体运动。当然, 如果对平衡的要求不是非常高的话, 采用简单的分裂方法同样可以较好地模拟含重力场的气体以及磁流体等流动问题^[38-42]。

为研究稀薄气体流动, 当 Kn 数比较小时, 可以结合基于宏观量的固壁滑移边界条件直接应用 BGK-NS 求解器。更合理的边界条件是通过分布

函数考虑气体在壁面上不同的反射模型, 从而自动引入速度滑移和温度跳变条件。这种方法在从低速微流动到高超声速近连续流动中得到了成功应用^[25, 43-47]。当 Kn 数更大一些的时候, 可以考虑逼近更高一阶的 Burnett 或 Super-Burnett 方程^[25, 48-49]。为更好地研究非平衡气体流动, 需要考虑不同平动、转动以及振动自由度的松弛效应, 同时将部分高阶效应通过对有效碰撞时间的模化考虑进去, 从而建立多温度气体动力学格式。这里涉及不同内能分量向平均内能的松弛, 以及流动向平衡态的松弛两个不同的过程。当流场光滑时, 可以导出与格式相对应的一套全新的关于宏观量的控制方程组。多温度气体动力学格式在诸如激波结构以及微喷管等多种流动中得到成功应用^[50-61]。

为增强其实际应用能力, 已有研究将 GKS 与非结构网格^[62-63]、无网格^[64]以及动网格技术^[65-69]进行了成功结合。同时, 格式在低速和不可压缩流动中也得到成功应用^[70-73]。另外, 为提高格式的精度, GKS 与 DG(discontinuous Galerkin)方法进行了成功的结合 (DG-BGK 格式)^[74-76]。

特别需要指出的是, 气体动力学格式由于在描述单元界面上初始物理量的演化过程是将分子的自由运动和相互碰撞耦合起来, 因而在高超声速流动, 特别是热流的模拟中显示了优异的性能^[26-27, 43, 77]。在湍流领域, 无论是直接模拟^[78-82], 还是结合湍流模型进行工程模拟^[78-81], GKS 也都显示了良好的性能。

气体动理论的丰富物理内涵保证了动力学格式在拥有较高精度的同时, 还具有很好的稳健性。这对 CFD 方法的实际工程应用非常重要。此外, 计算效率的高低及对复杂网格的适应性都将直接影响到其工程应用前景。GKS 中由于涉及半无限速度空间上的取矩运算, 需要用到余差函数, 因此通量的计算量较传统基于近似 Riemann 解的方法稍大。但是, 考虑到动力学方法是单步格式, 在时间和空间上都具有二阶精度, 并且与黏性有关的通量不需要单独计算, 因此总的计算效率与传统方法是相当的。更何况现代 CFD 程序的计算开销远不止通量的计算。气体动力学格式的核心在于采用气体动理论来描述计算网格单元界面上重构初始场的演化, 从而得到界面上的数值通量, 因此传统 CFD 方法中的流场重构技术、网格技术、收敛加速技术等都可以直接加以利用。图 2 所示为采用 GKS 计算得到的高超声速双椭球绕流算例中

物理量的分布, 其中来流马赫数为 8.02, 总温度为 720 K, 雷诺数为 1.98×10^7 , 壁温为 300 K, 攻角为 0° . 计算网格为 $150 \times 70 \times 60$, 最小网格雷诺数约为 20. 从图 2 中可以清楚地看到背风面二次分离流动等细节特征, 对称线上的压力分布也与实验测量 [87] 相当吻合. 计算中采用了贴体网格, 并采用 LU-SGS 技术加速计算的收敛. 为捕捉湍流的影响, 可以利用有效碰撞时间的概念在格式中直接引入湍流模型. 图 3 为 M6 机翼跨音速绕流算例, 其中

$M = 0.84$, $\alpha = 3.06$, $Re = 1.2 \times 10^7$, 网格总数为 $132 \times 56 \times 80$. 从图 2 中可以看到不同的湍流模型对计算结果的影响. 其他的应用包括多种高超声速复杂流动 [88]、汽车后视镜绕流 [89]、涌潮 [90] 及等离子体流动 [91] 等. 其中后者将动理学格式与直接求解 Boltzmann 方程的求解器进行了分区混合. 这些初步应用研究表明了气体动理学格式的良好性能, 为后续进一步实用化和工程应用奠定了基础.

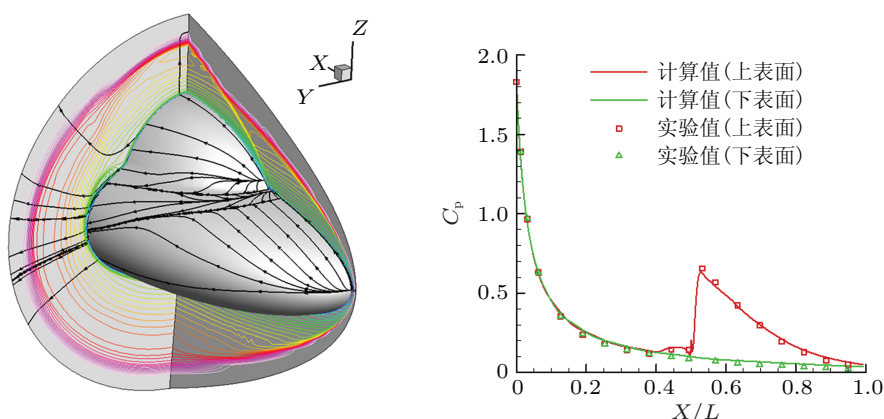


图 2 高超声速双椭球绕流中马赫数等值线、物面流线及对称面上的物面压力分布

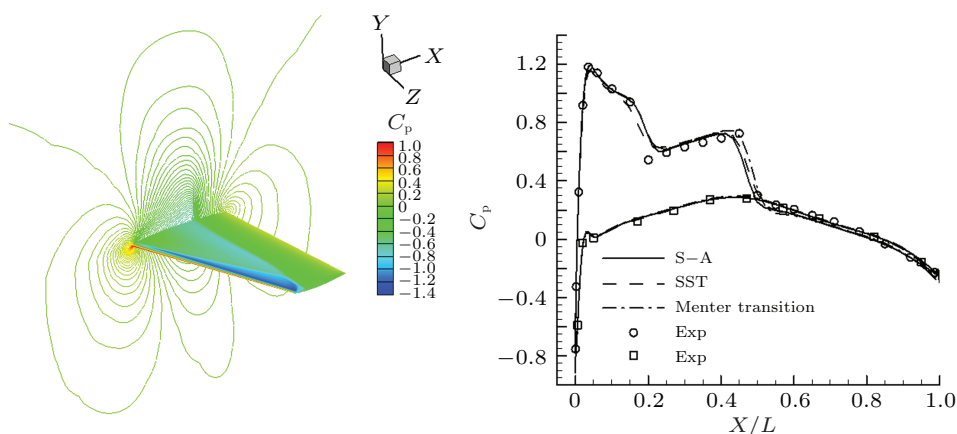


图 3 M6 机翼表面/对称面

4 高阶精度气体动理学格式

前面介绍的 BGK 格式中单元界面上数值通量关于时间和空间都是二阶精度. 虽然可以通过采用高阶重构来提高格式的精度, 但都不能从本质上提高格式精度的阶数. 其原因就在于通量函数中并未考虑到物理量高阶空间/时间导数的影

响. 事实上, 采用前文中介绍的思路, 只要构造出合适的初始分布函数 f_0 和平衡态分布 g , 就可以利用 BGK 方程的通解发展出相应的数值方法. 为构造逼近 NS 方程的高阶精度的 BGK-NS 求解器 (high-order gas-kinetic scheme, HGKS 或 HBGK), 可以考虑对分布函数 (11), (12) 进行更高阶的 Taylor 展开 [92]

$$f_0(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\xi}) = g^l [1 + a^l x - \tau(a^l u + A^l) - \tau(a^l A^l + C^l)x + ((a^l)^2 + b^l)(-\tau u x + x^2/2)] \cdot (1 - H[x]) + g^r [1 + a^r x - \tau(a^r u + A^r) - \tau(a^r A^r + C^r)x + ((a^r)^2 + b^r) \cdot (-\tau u x + x^2/2)] H[x] \quad (18)$$

$$g(\mathbf{x}, t, \mathbf{u}, \boldsymbol{\xi}) = g_0 [1 + ax + At + (a^2 + b)x^2/2 + (A^2 + B')t^2/2 + (C + Aa)xt] \quad (19)$$

其中系数可以由重构出的宏观物理量高阶导数及相容条件给出

$$a^2 + b = (\partial^2 g / \partial x^2) / g$$

即 $\langle a^2 + b \rangle = \partial^2 Q / \partial x^2 \quad (20)$

$$\langle C + Aa + u(a^2 + b) \rangle = 0$$

$$\langle A^2 + B' + (C + Aa)u \rangle = 0 \quad (21)$$

这样, 通过通解式 (10) 就可以得到单元界面上具有时间和空间三阶截断误差的分布函数 f

$$f(\mathbf{0}, t, \mathbf{u}, \boldsymbol{\xi}) = (1 - e^{-t/\tau})g_0 + [-\tau + (t + \tau)e^{-t/\tau}]aug_0 + (t - \tau + \tau e^{-t/\tau})Ag_0 + [\tau^2 - (t^2/2 + \tau t + \tau^2)e^{-t/\tau}](a^2 + b)u^2 g_0 + [t^2/2 - \tau t + \tau^2(1 - e^{-t/\tau})](A^2 + B')g_0 + [2\tau^2 - \tau t - (\tau t + 2\tau^2)e^{-t/\tau}] \cdot (C + Aa)ug_0 + e^{-t/\tau} \{ [1 - u(t + \tau)a^l - \tau A^l - \tau t(A^l a^l + C^l)u + (\tau t + t^2/2)[(a^l)^2 + b^l]u^2 \} H(u)g^l + \{ [1 - u(t + \tau)a^r - \tau A^r - \tau t(A^r a^r + C^r)u + (\tau t + t^2/2)[(a^r)^2 + b^r]u^2 \} \cdot (1 - H(u))g^r \} \quad (22)$$

进而得到时间和空间方向均为三阶精度的守恒量通量. 单元界面上的守恒量及其一、二阶导数可以由高阶重构得到 [92-93].

当流场比较光滑时, 上述分布函数的主要部分可以简化为

$$f = g_0 \left[1 - \tau(au + A) + At - \tau t(aA + C)u + (-\tau t + t^2/2)(A^2 + B') \right] \quad (23)$$

对比 BGK-Burnett 方程的解可以发现 [49], 如果去掉 Burnett 中与 τ^2 有关的项, 就可以得到上述以三阶精度逼近 NS 方程的分布函数. 事实上, 正是多出来的这些项, 导致 Burnett 方程的解在网格尺度比较小的时候存在不稳定性. 而本文中逼近 NS 方程的高阶精度格式中不存在这些项, 因而没有这个问题. 当然, 考虑到初值的间断后, 分布函数式 (22) 中增加了部分与 τ^2 有关的项, 这反映了界面上从自由流动向平衡流动的转变过程中的非线性. 实际上, 在有间断出现的时候, NS 方程本身的正确性是值得怀疑的. 就是在连续流的时候, 当二阶导数出现时, 式 (22) 也不能完全回到式 (23). 这不值得惊讶, 因为 NS 方程的模型只考虑到传输流量和物理量的一阶导数有关. 而 BGK 模型在平衡态的积分项中把二阶导数项对流量的影响也加进来了, 虽然它们的贡献在连续流时会很小. 为更好地逼近 NS 方程, 也可以忽略这些项.

上面介绍的是基于方向分裂技术建立的数值方法, 其中忽略了每个计算时间步内物理量沿界面切向的变化. 为提高格式的精度, 可以考虑包含这种影响, 也就是建立真正的多维格式. 此时, 只需在 f_0 和 g 中增加平衡态分布的切向导数部分项即可. 具体过程可参考文献 [94-96]. 研究表明, 即使对于二阶精度的动理学格式, 在某些对物理量导数比较敏感的流动中, 如存在壁面速度滑移或者幂律流体流动中, 真正多维格式将具有明显的优势. 作者正在开展的研究表明, 对高阶精度格式, 这种优势将更加明显. 相比之下, 对于传统直接基于宏观物理量的数值方法, 由于缺乏真正多维的 Riemann 解, 构造真正多维格式非常困难. 这也反映了在高维空间, 或者说更基本的层次上研究流体运动, 如基于气体动理论, 具有独到的优势.

这里给出一个二维低速平板边界层流动算例. 平板长度 $L = 100$, 平行于平板来流马赫数 $M = 0.15$, 雷诺数 $Re = U_\infty L / \nu = 1 \times 10^5$. 计算网格数是 120×30 , 其中 $x \geq 0, y = 0$ 为平板, 网格采用指数形式拉伸, 最小流向网格尺度 $\Delta x_m = 0.1$, 法向网格尺度 $\Delta y_m = 0.07$. 不考虑尾缘影响. 入流和上边界采用基于 Riemann 不变量的无反射条件, 右边界采用线性外差处理. 壁面物理量由绝热条件给出. 从图 4 中可以看到, 本文高阶精度 GKS 仅用 4 个网格点就能很好地刻画边界层里的流向和法向速度分布.

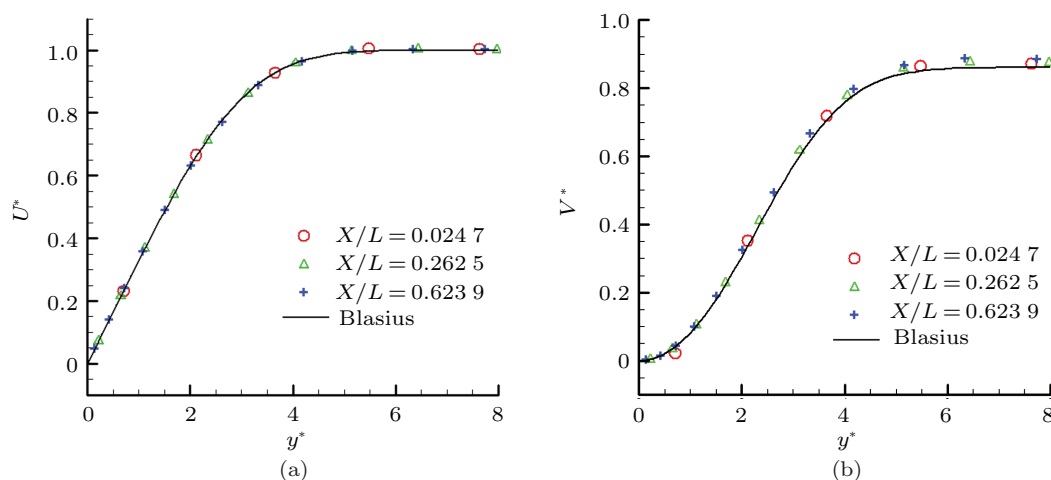


图 4 平板边界层流动中不同流向位置上的无量纲速度分布

5 统一气体动力学格式

上面介绍的是针对连续流动或者近连续流动的数值方法。对飞行高度更高的飞行器或者微机电系统 (micro-electromechanical systems, MEMS) 中面临的从连续到稀薄的流动, 现有研究多是采用混合基于连续流动的数值方法和在稀薄流领域取得巨大成功的 DSMC (direct simulation Monte Carlo)。采用混合方法的根本原因在于 DSMC 方法在低速和近连续流领域的效率低下。特别是在低速稀薄流动中, 即使是定常流动, 由于需要非常巨大的统计样本来获得远小于热运动随机涨落的宏观平均流动物理量, DSMC 方法的应用受到极大的限制。因此有不少研究工作集中在提高 DSMC 效率的方向。对温度变化不大的低速稀薄流动, IP (information preservation) 方法显示了非常显著的改进效果^[97-98]。混合方法面临的一个直接问题就是, 不同求解器的分区标准如何选取? 另外, 由于两种求解器在交界区域重叠计算, 这就意味着在这个区域, 两种求解器均有效。从理论上讲, 这个要求是难以准确满足的。因此, 更合适的方法还是直接离散求解 Boltzmann 或者 BGK 方程, 如离散速度法 (DVM)、统一算法等。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成功应用^[14-16,99-100]。但是, 已有直接求解方法的一个不足之处在于, 采用算子分裂后分子碰撞和自由运动是解耦的, 因此推进的时间步长受碰撞时间的限制。考虑到方法本身的计算量较大, 这种限制极大地影响了其在近连续流动中的实际应用效率。实际上, DSMC 方法同样存在这个困难。理论上, 一旦运动和碰撞的物理过程被 Boltzmann 方程从统计上模化后, 自由运动和碰撞在时间和空间上变

成了连续作用, 数值离散就应该与此相一致。

在最近的研究工作中, 通过分子离散速度空间, 将气体动力学 BGK-NS 格式从连续流拓展到稀薄流域, 基于 BGK 模型建立了适合整个 Knudsen 数流动的多尺度统一气体动力学格式 (unified gas-kinetic scheme, UGKS)^[101]。与分区混合方法不同的是^[102], 格式将每个时间步长内宏观量的更新和微观气体分布函数的更新紧密地耦合在一起。与已有许多求解 Boltzmann 方程的动理学方法相比, 当时间步长远大于碰撞时间时, 新格式在连续流领域可以获得精确的 NS 解。同时, 稀薄流动, 甚至自由分子流, 都可以得到精确的预测。这就保证了 UGKS 的计算效率在高速流动中能与 DSMC 相当, 而在低速流动 (如 MEMS) 中能远远高于 DSMC^[103]。

由于统一格式中的多尺度性质, 在宏观量的更新过程中, 热流可以根据实际的 Prandtl 数进行修正。随后, 这种修正影响到下一个时间步上的平衡态和微观速度分布函数的更新。因此, 与修改 BGK 模型的碰撞项不同, 比如 ES-BGK 或者 BGK-Shakhov, 统一格式可以直接在数值上达到同样的目标。新建立的统一格式得到了许多数值算例的成功验证, 有望在航天工程领域得到广泛的应用。图 5 给出了来流马赫数 5, Knudsen 数 1 时, 气流通过圆柱表面时产生的热流分布^[104]。从图 5 中可以看到, 采用统一气体动力学格式预测的壁面热流与 DSMC 的计算结果符合得相当好。这也再次有力地说明, 在数值方法中只需要对 BGK 模型进行很小的修正, 反映宏观物理意义的 Prandtl 数就能得到正确的模拟。对求解稀薄气体流动的数值方法而言, 一个具有挑战性的算例是

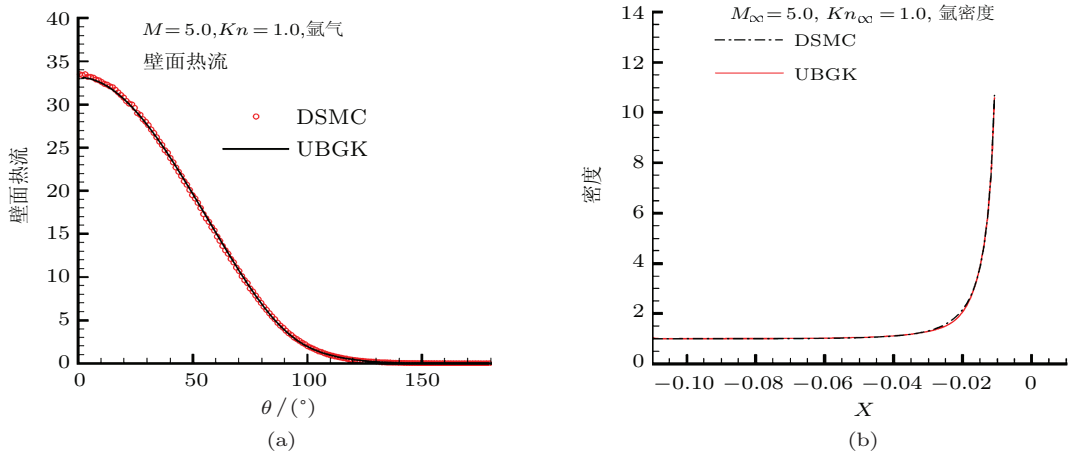


图 5 高超声速圆柱绕流中壁面热流以及圆柱前对称线上的密度分布

稀薄气体中声波传播问题 [105]. 图 6 给出了采用统一气体动理学格式计算得到的不同 Knudsen 数 ($0.08 < Kn < 32$) 下声波的相速度和衰减系数的变化情况. 这里 Kn 定义为声波频率与气体分子平均碰撞频率的比值. 从图 6 中可以看到统一格式得到的结果与实验值非常符合. 考虑到速度空间的离散导致的巨大计算量, 最近的研究已经在格式中引入了速度空间自适应技术, 并与动网格方法进行了结合 [106]. 考核的算例是一个稀薄环境中二维喷管喷气推进问题. 流场中当地 Knudsen 数变化范围为 $5 \times 10^{-6} < Kn < 0.05$. 由于喷管内

外巨大的密度差异, 同时气体分子速度分布也存在非常大的变化, 再加上流动非定常, 该算例极具挑战性. 图 7 给出了计算得到的压力和温度场分布. 注意到统一气体动理学格式在连续和近连续流动中的高效性, 与速度空间自适应技术的结合将极大地增强方法的工程实用性能. 当 DSMC

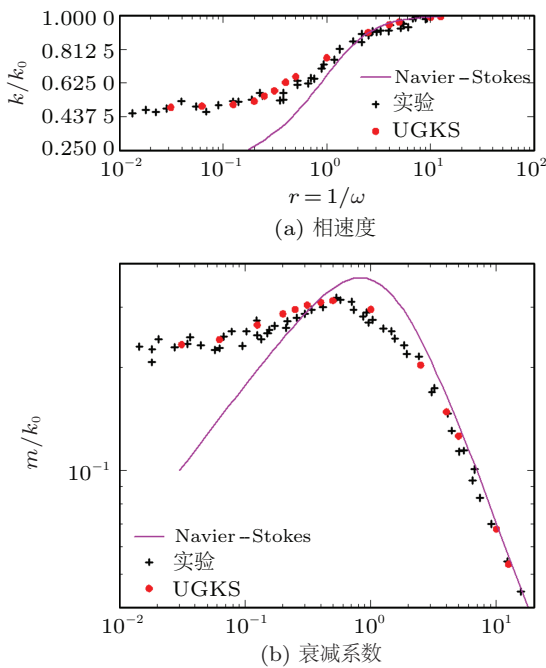


图 6 稀薄气体中声波传播相速度和衰减系数的变化

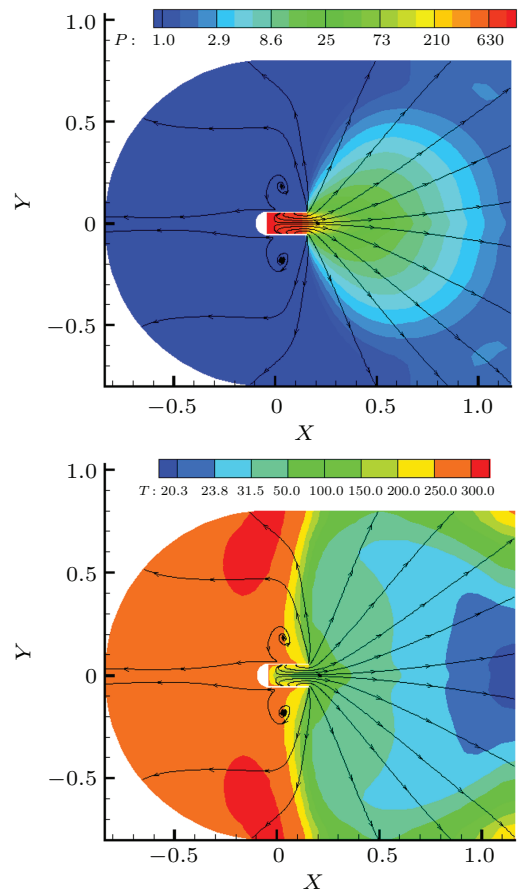


图 7 稀薄气体中喷流瞬时压力和温度场分布

的开创者 Bird 教授看到以上喷管算例时说, 统一气体动力学格式可能是近 45 年来模拟稀薄流的最大突破.

6 数值方法中的物理模型

经过近 40 年的努力, 国内外研究学者发展出了大量高精度、高分辨率的计算流体力学方法, 在越来越多的领域取得了成功应用, 有力地推动了相关学科和工业应用的发展. 然而, 现有数值方法与实际应用的要求仍然存在不小的距离, 除求解的流动模型 (如湍流模型、高温气体物理-化学模型等, 不在本文探讨范围以内) 不完善以外, 使用者的经验还在很大程度上影响到计算结果的好坏. 换句话说, 数值方法本身还亟待改进.

影响一种数值方法性能的因素有很多. 对可压缩流动的有限体积方法而言, 除了良好的计算网格与合理的边界条件外, 重构和演化步的具体处理手段都将直接影响到格式的最终表现. 由于这些因素一般相互耦合, 仅从有限数值结果的好坏角度难以区分各自的影响. 因此有必要先对各个因素进行单独研究, 仔细分析其内在的机理, 然后再组合到一起研究其相互间的影响, 最后才能讨论对数值格式的整体影响. 也就是说, 需要深入分析数值格式中离散空间上的物理机制.

近年来大量研究集中在网格单元内物理量的高质量重构上, 无论是 WENO (weighted essentially non-oscillation) 还是 DG 皆是如此. 由于有限体积方法是基于严格的物理守恒定律来更新网格内的守恒量, 大多数算例对于通过网格边界上的流量不是很敏感, 这就造成了当前各种各样的数值流量计算方法. 但从科学的角度来讲对于一个初值, 通量计算应该是唯一的. 除守恒量外 DG 格式也通过守恒形式推进物理量的梯度. 对于以上 DG 格式我们应本着更科学的态度来审视它. 一个本质而严肃的问题是在流场存在间断的情况下, 在物理上有没有梯度量演化的守恒形式. 如果没有, 通过数学变换得到的 DG 的演化方程是否可靠? 对于 WENO 和 DG 格式, 本文对此不做赘述, 而将重点放在演化步所采用的物理模型对数值方法的影响上.

数值离散使得计算得到的流场与真实的物理流场相比增加了一个新的长度尺度, 并且是可分辨的最小尺度, 即网格尺度. 而基于连续介质假设的宏观方程 (NS, Euler) 的最小尺度是流体微团的

尺度, 即“宏观足够小, 微观足够大”. 需要注意的是, 无论是 NS 方程还是 Euler 方程, 其物理模型 (假设) 隐含的可分辨最小尺度都是宏观尺度, 但前者由于能在很大程度上刻画黏性的影响, 因而实际上比后者具有更小的最小尺度. 但是, 当物理模型由微分方程来描述后, 数学意义上的最小尺度变成了无限小 (零). 换句话说, 物理模型表现出的性质会受到描述方式的限制. 小于最小尺度的物理量的影响需要通过额外的建模来加以考虑, 如宏观方程中耗散与内能的关系, 数值方法中的重构等. 最小尺度的差异决定了数值解、物理解 and 偏微分方程的解之间存在差异. 从逼近真实物理解的角度看, 可以通过数值逼近偏微分方程的解, 进而逼近物理解, 这是传统 CFD 的求解思路. 也可以直接通过数值解来逼近物理解, 这需要直接在离散空间上建模. 当然, 建立的模型本身可以通过离散形式, 也可以通过偏微分方程的形式来描述. 随着网格尺度的减小, 前者应该逐渐逼近偏微分方程的解, 后者则可能直接趋近物理模型所对应的解. 现代 CFD 方法的核心问题是如何处理流场间断. 这里的流场间断来源于描述物理过程的数值的最小网格尺度远大于真实物理量变化的尺度. 对偏微分 Euler 方程而言, 间断是指数学上的“无厚度”结构. 对数值计算而言, 通常情况下, 由于计算量的限制, 最小网格尺度有限, 不能准确捕捉激波等间断的内部结构, 因而只能寄希望给出宽度为与网格尺度同量级的数值间断. 即使在光滑流动区域, 受网格尺度的限制, 同样也可能将变化剧烈 (尺度小于网格尺度) 的结构处理成数值间断. 有限体积方法通过重构得到网格单元内物理量的分布, 从而得到界面两侧的物理量, 进而通过求解该重构间断 (无厚度) 初场的演化来获得穿过界面的数值通量. 不同的重构方式和不同的演化模型为格式模拟复杂流场奠定了基础, 特别是为捕捉流场间断提供了可能. 从数值耗散的角度看, 通过重构不同的间断初场, 可以控制格式中引入耗散的大小, 从而在网格尺度上捕捉流场间断. 对中心型格式而言, 由于重构出的界面物理量连续分布, 需要额外引入人工黏性来保证足够多的耗散.

对演化步而言, 问题的关键在于如何精确描述界面上重构出的初始间断随时间的演化. 传统基于宏观量的数值方法的核心是 Euler 方程的 Riemann 解, 并结合多步时间积分技术. 对无黏流动而言, 原始非线性控制方程中的时-空演化的强耦

合作用似乎被弱化了. 一个有意思的问题是, 通常情况下 (Lagrange 方法除外), 利用数值方法得到的数值激波跨越了 2~3 个网格, 也就是说实际上给出的是连续的激波结构. 这时数值激波内部的单元界面两侧经过重构后出现一个新的初始子间断. 一般而言, 这个子间断两侧物理量是否满足激波关系式就成了问题. 换句话说, 将一个光滑激波结构分成了几个子间断后, 通过 Riemann 解能否维持一个符合物理要求的光滑的数值激波? 再进一步, 直接基于 Riemann 解的 Godunov 格式在计算钝体绕流时的激波不稳定 (carbuncle) 现象, 是否与此有关? 另外, 对黏性流动, 基于分段连续重构出的初始间断和 NS 程的双曲-抛物性质在数学上似乎并不相容, 如初始间断导致的黏性项和热传导项的歧义问题. 当然, 常用的做法是对黏性项直接采用中心差分离散. 这种无黏和黏性通量的分别计算并直接叠加在理论上是否相容?

从微观层次看, 计算网格单元界面上初始间断演化的真实物理过程应该是, 从最初的自由分子运动, 到通过碰撞从而建立流场结构. 也就是说, 依次经历从 $t \ll \tau$, $t \sim \tau$ 和 $t \gg \tau$ 3 个阶段, 分别对应自由分子流、过渡流和连续流运动. Euler 方程的解对应于 $t \gg \tau$ 时气体经过大量碰撞后达到平衡状态. 换句话说, 只有在一个时间步长内有无穷多的碰撞才能建立起分立的 Euler 方程的波结构. 而无穷多的碰撞在 (有限宽度的数值) 激波结构中是不可能发生的. 对于高马赫数的真实物理激波, 分子从上游到下游也只经过几次到几十次碰撞. 在激波里面, 不可能形成像 Euler 方程所给出的各种波. 需要注意的是, 这里的平均碰撞时间 τ 可能从数值角度理解更合适: 数值激波的宽度 $s \sim \Delta x$, 而运动的平均自由程 $l \sim s$, 因此平均碰撞时间 $\tau \sim \Delta x / \bar{u} \sim \Delta x / a$. 其中 a 为声速, \bar{u} 为热运动的速度. 实际上, 根据显式格式稳定性要求, $\Delta t \sim \Delta x / (U + a) = (\Delta x / a) / (1 + M)$, M 为马赫数. 这就意味着, 气体实际上在一个计算时间步长内难以完成足够多的碰撞从而达到平衡状态. 当然, 这里考虑的数值激波宏观宽度也可能来自于投影步引入的额外耗散, 而不仅仅是演化步. 退一步讲, 即使这里的碰撞时间是真实的物理值, 在高超声速流动中, 受计算稳定性的限制, 计算时间步长仍有可能与平均碰撞时间同量级, 甚至更小. 这时以 Euler 方程为演化步的控制方程是否合适是值得商榷的. 也许有人会想, 求解 NS 方程时, 在无黏格式的基础上加上黏性通量项, 是否就没问

题了呢? 答案仍然不容乐观. 从理论上讲, NS 方程同样只能描述 $t \gg \tau$ 时的流动 (连续流区), 不能刻画初始间断的早期演化, 从而导致宏观上黏性项和热传导项的歧义问题. 对高超声速流动, $\Delta t / \tau$ 较小, 问题同样会更严重.

需要说明的是, 这里的“稀薄”流动 (自由分子流、过渡流) 来源于数值离散后可解尺度的变化, 以及界面上重构出的间断初始场. 从数值耗散的角度看, 初始阶段间断附近气体分子的自由运动 (混合) 是一个熵增显著的过程, 从而引入较大的耗散; 而分子间的相互碰撞却使得分子系统微观状态数的变化减少, 这就意味着熵增的减少, 从而导致耗散的降低. 有限体积格式除投影步中 (或者重构、熵修正等处理过程中) 会或多或少引入耗散外, 多步 Runge-Kutta 积分步中也会引入一定的耗散, 所以即使名义上求解的是无黏流动, 实际求解的却是有黏性的流动. 这也就意味着, 在一个时间步内气体不要求达到平衡态. 但问题是, 由于这时很难找出真正对应的控制方程, 无法确定引入的黏性 (耗散) 是否相容, 大小是否合适. 特别是在计算黏性流动时, 引入的数值黏性是否足够保证计算的稳定? 它对真实黏性的干扰如何? 这些问题直接关系到壁面摩阻和热流模拟的准确性. 实际上, 引入的数值黏性还与不同流动状态以及计算网格的分布等因素有关, 从而使得实际应用中 CFD 计算结果的好坏在很大程度上依赖于使用者的经验. 换句话说, 传统格式由于直接基于宏观物理量 (至少在演化步中), 难以直接控制数值黏性的大小.

相比之下, 从动理学 BGK-NS 格式界面分布函数的演化方程 (15) 和 (21) 中可以清楚地看到, 气体经历了从完全无碰撞到经过大量碰撞后向平衡态趋近整个历程. 这也正是 BGK 方程的通解式 (10) 中所反映的物理图像. 另外, 还有

$$f|_{t \rightarrow 0} = [1 - \tau(a^l u + A^l)] H(u) g^l + [1 - \tau(a^r u + A^r)] (1 - H(u)) g^r \quad (24)$$

$$f|_{t \rightarrow \infty} = [1 - \tau(au + A) + tA] g_0 \quad (25)$$

积分式 (24)~(25) 求得通量后不难发现, 得到的数值方法分别对应迎风型 (KFVS) 格式和中心差分型格式. 也就是说, 随着时间的增长, BGK-NS 格式逐渐由 KFVS 格式的性质转变成具有中心格式的特性. 并且在间断较强的时候, $\Delta t / \tau$ 越小, 格式中的迎风特性越大. 我们已经知道, KFVS 格式不

会出现 carbuncle 现象. 因此, 一般而言, 气体动力学格式也不会出现 carbuncle 现象. 这一结论与已有研究相吻合. 实际上, 一个优秀的格式应该是兼有迎风格式和中心格式两种特性, 才能准确模拟类似高超声速黏性流动这种间断和光滑流区共存的复杂流动. 气体动力学格式通过基于气体动理论的合理的物理模型, 将这两种类型的格式有机地结合起来.

上述 GKS 的物理机制也同样可以从数值耗散角度加以分析. 我们已经知道, 迎风格式的耗散大, 中心格式耗散小. GKS 从迎风型向中心型格式转化的过程中自动引入了随时间变化的数值耗散, 并且这种变化的耗散与界面上初始间断的物理演化是一致的, 因而在实际应用中具有很好的稳健性和精度. 最近的研究工作也验证了上述分析^[107]. 在求解无黏流动时, 分别采用 GKS 和时间方向能达到二阶精度的 GRP 求解器^[9], 基于相同的网格和重构方法, 在许多具有挑战性的一维算例中均能取得很好的结果. 在计算高马赫数圆柱绕流的时候 GRP 存在 carbuncle 现象, 而 GKS 却仍然能得到光滑的流场解 (见图 8). 考虑到 GRP 求解器是当前最为精确的 Riemann 求解器, 其中并没有采用多步 Runge-Kutta 积分, 从理论上讲, 虽然不能排除通过选择合适的重构方法来消除激波不稳定问题的可能性, 但考虑到实际数值求解的流动总是包含一定黏性, 是否有必要采用 Euler 方程而不是其他更为合适的物理模型?

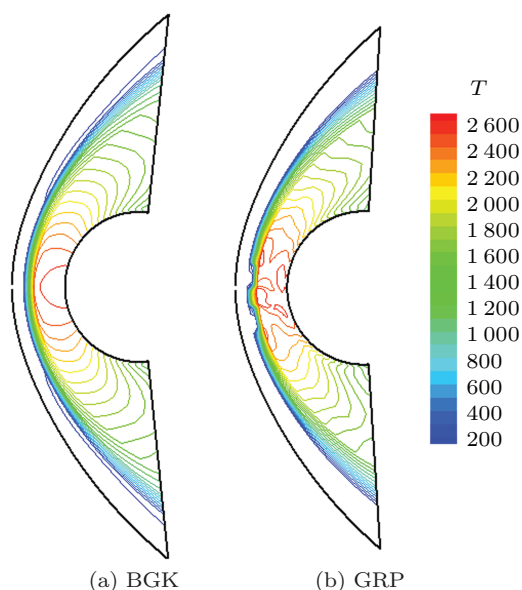


图 8 圆柱绕流中温度场分布

实际上, 物理模型的重要性在前述统一气体动力学格式中也是显而易见的. 由于实际运动中分子自由运动与相互碰撞是同时进行且相互耦合的, 若采用分裂算法, 自由运动和碰撞的解耦只有在计算的时间步长远小于平均碰撞时间时其物理模型才是正确的, 这也就极大地限制了 DSMC 和已有的很多 Boltzmann 方程直接求解方法在近连续流动中的计算效率. 统一气体动力学格式将这两个过程耦合求解, 更加符合物理实际, 因而具有非常好的性能.

总之, 描述单元界面上初始间断演化的物理模型对数值格式的性能有重要的影响. 合理的物理模型是正确计算数值通量的基础. 在此基础上, 探索合理的重构技术才不会是空中楼阁.

7 结 语

本文概述了气体动力学格式的基本原理和研究现状, 重点介绍了高阶精度动力学格式 (HGKS) 和统一气体动力学格式 (UGKS) 的研究进展, 并对可压缩流动有限体积格式演化步中的物理模型进行了探讨. 通过对速度分布函数的高阶展开和对初值的高阶重构, 可以构造高阶精度的气体动力学格式, 为发展高精度黏性求解器提供了一条新的途径. 通过分子离散速度空间, 将气体动力学格式从连续流拓展到稀薄流域, 建立了适合整个 Knudsen 数流动的多尺度统一气体动力学格式. 新格式将每个时间步长内宏观量的更新和微观气体分布函数的更新紧密地耦合在一起, 相比于已有类似方法具有更高的求解效率.

合理的物理模型是可压缩有限体积格式的关键. 气体动力学格式采用 (修正的) BGK 模型方程来描述计算网格单元界面上重构出的初始间断的时间演化, 保证了格式的准确性和稳健性. 从宏观上看, 格式中自动引入了与初始间断有关的随时间变化的物理过程. 对近连续流动而言, 气体分子自由运动和碰撞的耦合具有重要的意义. 无论是 BGK-NS 求解器还是统一格式的成功都说明了这一点.

从建立到现在近 20 年来, 气体动力学格式得到了飞速发展, 在越来越多的领域显示了良好的性能. 格式的完善和实际工程应用将是下一步的研究重点, 具体包括: 结合高质量重构技术以提高格式的性能; 提高格式时间方向推进效率的加速技术; 复杂网格上格式, 特别是高精度格式的拓展;

与更多流动物理模型的结合,如湍流模型、双原子内能松弛模型、多组元化学反应模型等.在此基础上,气体动理学格式不仅能为流动机理研究提供有力的工具,而且有望在航空航天等工程领域得到广泛的应用.

参 考 文 献

- 1 马延文,傅德薰.高精度有限差分法与复杂流动的数值模拟. *自然科学进展*, 2002, 12(8): 785-793
- 2 邓小刚,刘昕,毛枚良,等.高精度加权紧致非线性格式的研究进展. *力学进展*, 2007, 37(3):417-427
- 3 高智.数值摄动算法及其 CFD 格式. *力学进展*, 2010, 40(6):607-633
- 4 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
- 5 Chen J, Shu C W. High order schemes for CFD: a review. *计算物理*, 2009, 26(5):633-655
- 6 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
- 7 Pereira J M C, Kobayashi M H, Pereira I C F. A fourth-order-accurate finite volume compact method for the incompressible Navier–Stokes solutions. *J. Comput. Phys.*, 2001, 167:217-243
- 8 Popescu M, Vedder R, Shyy W. A finite volume-based high-order Cartesian cut-cell method for wave propagation. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 2008, 56: 1787-1818
- 9 Ben-Artzi M, Falcovitz J. *Generalized Riemann Problems in Computational Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, 2003
- 10 Xu K, Prendergast K H. Numerical Navier–Stokes solutions from gas-kinetic theory. *J. Comput. Phys.*, 1994, 114(1): 9-17
- 11 Xu K. Gas-Kinetic Schemes for unsteady compressible flow simulations. In: 29th CFD Lecture Series 1998-03 von Kármán Institute for Fluid Dynamics, Belgium, 1998
- 12 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: 289-335
- 13 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: 511-525
- 14 Chu C K. Kinetic-theoretic description of the formation of a shock wave. *Phys. Fluids*, 1965, 8: 12
- 15 Yang J Y, Huang J C. Rarefied flow computations using nonlinear model Boltzmann equations. *J. Comput. Phys.*, 1995, 120(2): 323-39
- 16 Li Z H, Zhang H X. Gas-kinetic numerical studies of three-dimensional complex flows on spacecraft re-entry. *J. Comput. Phys.*, 2009, 228: 1116-1138
- 17 Chen S, Doolen G. Lattice Boltzmann method for fluid flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 1998, 30: 329-64
- 18 Ohwada T, Kobayashi S. Management of discontinuous reconstruction in kinetic schemes. *J. Comput. Phys.*, 2004, 197: 116
- 19 K Xu. A slope-update scheme for compressible flow simulation. *J. Comput. Phys.*, 2002, 178(1): 252-261
- 20 Torrilhon M, Xu K. Stability and consistency of kinetic upwinding for advection-diffusion equations. *IMA J. Numer. Anal.*, 2006, 26: 686-722
- 21 Liu S H, Xu K. Entropy analysis of kinetic flux vector splitting schemes for the compressible Euler equations. *Z. Angew. Math. Phys.*, 2001, 52(1): 62-78
- 22 Xu K, Martinelli L, Jameson A. Gas-kinetic finite volume methods flux-vector splitting and artificial diffusion. *J. Comput. Phys.*, 1995, 120: 48-65
- 23 Mandal J C, Deshpande S M. Kinetic flux vector splitting for Euler equations. *Comput. Fluids*, 1994, 23(2): 447-78
- 24 Chou S Y, Baganoff D. Kinetic flux-vector splitting for the Navier–Stokes equations. *J. Comput. Phys.*, 1997, 130(2): 217-230
- 25 Li Q B, Fu S, Xu K. Application of BGK scheme with kinetic boundary conditions in hypersonic flow. *AIAA J.*, 2005, 43: 2170
- 26 Xu K, Li Z H. Microchannel flows in slip flow regime: BGK-Burnett solutions. *J. Fluid Mech.*, 2004, 513: 87-110
- 27 Xu K, Mao M L, Tang L. A multidimensional gas-kinetic BGK scheme for hypersonic viscous flow. *J. Comput. Phys.*, 2005, 203: 405
- 28 Xu K. BGK-based scheme for multicomponent flow calculations. *J. Comput. Phys.*, 1997, 134(1): 122-133
- 29 Lian Y S, Xu K. A gas-kinetic scheme for multimaterial flows and its application in chemical reaction. *J. Comput. Phys.*, 2000, 163: 349-375
- 30 Lian Y S, Xu K. A gas-kinetic scheme for reactive flows. *Comput. Fluids*, 2000, 29: 725-748
- 31 Li Q B, Fu S, Xu K. A compressible Navier–Stokes flow solver with scalar transport. *J. Comput. Phys.*, 2005, 204: 692-714
- 32 Xu K. A kinetic method for hyperbolic-elliptic equations and its application in two-phase flow. *J. Comput. Phys.*, 2001, 166(2): 383-399
- 33 Li Q B, Fu S. A gas-kinetic BGK scheme for gas-water flow. *Comput. Math. Appl.*, 2011, 61: 3639-3652
- 34 Que Y T, Xu K. The study of roll-waves in inclined open channels and solitary wave run-up. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, 2006, 50: 1003-1027
- 35 Ghidaoui M S, Kolyshkin A A, Liang J H, et al. Linear and nonlinear analysis of shallow wakes. *J. Fluid Mech.*, 2006, 548: 309-340
- 36 Xu K. A well-balanced gas-kinetic scheme for the shallow water equations with source terms. *J. Comput. Phys.*, 2002, 178: 533-562
- 37 Luo J, Xu K, Liu N. A well-balanced symplecticity-preserving gas-kinetic scheme for hydrodynamic equations under gravitational field. *SIAM J. Sci. Comput.*, 2011, 33(5): 2356-2381
- 38 Tian C L, Xu K, Chan K L, et al. A three-dimensional multidimensional gas kinetic scheme for the Navier–Stokes equations under gravitational fields. *J. Comput. Phys.*, 2007, 226: 2003-2027
- 39 Tang H Z, Xu K, Cai C P. Gas-kinetic scheme for three dimensional magneto hydrodynamics. *Numer. Math. Theor. Meth. Appl.*, 2010, 3(4): 387-404
- 40 Xu K. Gas-kinetic theory based flux splitting method for ideal magneto hydrodynamics. *J. Comput. Phys.*, 1999, 153(2): 334-352
- 41 Tang H Z, Xu K. A high-order gas-kinetic method for multidimensional ideal magneto hydrodynamics. *J. Comput. Phys.*, 2000, 165(1): 69-88
- 42 Yang J Y, Hsieh T Y, Shi Y H, et al. High order kinetic flux vector splitting schemes in general coordinates for ideal quantum gas dynamics. *J. Comput. Phys.*, 2007, 227: 967-982
- 43 Liao W, Luo L S, Xu K. Gas-kinetic scheme for continuum and near-continuum hypersonic flows. *J. Spacecraft and Rockets*, 2007, 44(6): 1232-1240

- 44 Xu K, Liu H. Multiscale gas-kinetic simulation for continuum and near continuum flows. *Phys. Rev. E*, 2007, E75: 016306
- 45 Li Q B, Fu S. Applications of implicit BGK scheme in near-continuum flow. *Int. J. Comput. Fluid Dyn.*, 2006, 20(6): 453-461
- 46 毛枚良, 徐昆, 邓小刚. 动能 BGK 算法在近连续流模拟中的应用. *空气动力学学报*, 2005, 23(3): 317
- 47 赵建兵, 李启兵, 章光华, 等. 应用 BGK 格式数值模拟微槽道中的气体流动. *清华大学学报 (自然科学版)*, 2003, 43(8): 1083-1087
- 48 Xu K. Super-Burnett solutions for Poiseuille flow. *Phys. Fluids*, 2003, 15(7):2077-2080
- 49 Ohwada T, Xu K. The kinetic scheme for full Burnett equations. *J. Comput. Phys.*, 2004, 201: 315-332
- 50 Xu K, Liu H, Jiang J. Multiple temperature kinetic model for continuum and near continuum flows. *Phys. Fluids*, 2007, 19: 016101
- 51 Xu K. Regularization of the Chapman-Enskog expansion and its description of shock structure. *Phys. Fluids*, 2002, 14(4): L17-20
- 52 Xu K, Tang L. Non-equilibrium BGK model for nitrogen shock structure. *Phys. Fluids*, 2004, 16: 3824
- 53 Xu K, Liu H W. A Multiple temperature kinetic model and its application to near continuum flows. *Commun. Comput. Phys.*, 2008, 4(5): 1069-1085
- 54 Liao W, Peng Y, Luo L S, et al. Modified gas-kinetic scheme for shock structures in argon. *Prog. Comput. Fluid Dyn.*, 2008, 8: 97-108
- 55 Cai C P, Liu D, Xu K. A one-dimensional multiple-temperature gas-kinetic BGK scheme for shock wave computation. *AIAA J.*, 2008, 46(5): 1054-1062
- 56 Xu K. A generalized Bhatnagar-Gross-Krook model for nonequilibrium flows. *Phys. Fluids*, 2008, 20: 026101
- 57 Xu K, He X, Cai C. Multiple temperature kinetic model and gas-kinetic method for hypersonic nonequilibrium flow computations. *J. Comput. Phys.*, 2008, 227: 6779-6794
- 58 Xu K, Guo Z. Generalized gas dynamic equations with multiple translational temperatures. *Mod. Phys. Lett. B*, 2009, 23: 237-240
- 59 Xu K, Josyula E. A multiple translational temperature model and its shock structure solution. *Phys. Rev. E*, 71, 2005, 71: 056308
- 60 Xu K, Josyula E. Continuum formulation for non-equilibrium shock structure calculation. *Commun. Comput. Phys.*, 2006, 1(3): 425-450
- 61 Li Q B, Fu S. On the internal energy relaxation model for nonequilibrium flow. In: The 2nd International ISCM Symposium and the 12th International EPMECS Conference, Hong Kong - Macao, 2009-11-29-12-03
- 62 Ni G X, Jiang S, Xu K. Efficient kinetic schemes for steady and unsteady flow simulations on unstructured meshes. *J. Comput. Phys.*, 2008, 227: 3015-3031
- 63 Kim C, Jameson A. A robust and accurate LED-BGK solver on unstructured adaptive meshes. *J. Comput. Phys.*, 1998, 143(2): 598-627
- 64 Sun X M, He F. A high-order meshless Bhatnagar-Gross-Krook scheme based on point collocation. *Chin. Phys. Lett.*, 2004, 21(2): 233-236
- 65 Jin C Q, Xu K. An adaptive grid method for two dimensional viscous flows. *J. Comput. Phys.*, 2006, 218: 68-81
- 66 Jin C Q, Xu K. A unified moving grid gas-kinetic method in Eulerian space for viscous flow computation. *J. Comput. Phys.*, 2007, 222: 155-175
- 67 Jin C Q, Xu K. Numerical study of the unsteady aerodynamics of freely falling plates. *Commun. Comput. Phys.*, 2008, 3: 834-851
- 68 Ni G, Jiang S, Xu K. Remapping-free ALE-type kinetic method for flow computations. *J. Comput. Phys.*, 2009, 228: 3154-3171
- 69 Jing C Q, Xu K, Chen S Z. A three dimensional gas-kinetic scheme with moving mesh for low-speed viscous flow computation. *Adv. Appl. Math. Mech.*, 2010, 2(6): 746-762
- 70 Guo Z L, Liu H W, Luo L S, et al. A comparative study of the LBM and GKS methods for 2D near incompressible flows. *J. Comput. Phys.*, 2008, 227: 4955-4976
- 71 Xu K, He X Y. Lattice Boltzmann method and gas-kinetic BGK scheme in the low Mach number viscous flow simulations. *J. Comput. Phys.*, 2003, 190:100-117
- 72 Su M D, Xu K, Ghidaoui M S. Low-speed flow simulation by the gas-kinetic scheme. *J. Comput. Phys.*, 1999, 150(1):17-39
- 73 Xu K, Lui S H. Rayleigh-Benard simulation using the gas-kinetic Bhatnagar-Gross-Krook scheme in the incompressible limit. *Phys. Rev. E*, 1999, 60(1): 464-470
- 74 Xu K. Discontinuous Galerkin BGK method for viscous flow equations: one-dimensional systems. *SIAM J. Sci. Comput.*, 2004, 23(6): 1941-1963
- 75 Liu H W, Xu K. A Runge-Kutta Discontinuous Galerkin Method for Viscous Flow Equations. *J. Comput. Phys.*, 2007, 224: 1223-1242
- 76 Luo H, Luo L, Xu K. A Discontinuous Galerkin method based on BGK scheme for the Navier-Stokes equations on arbitrary grids. *Adv. Appl. Math. Mech.*, 2009, 1: 301-318
- 77 Li Q B, Fu S. Application of gas-kinetic BGK scheme in three-dimensional flow. AIAA 2011-386, 49th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including The New Horizons Forum and Aerospace Exposition, Orlando Florida, 2009-01-04-07
- 78 李启兵. 应用 BGK 格式对可压缩混合层的数值研究: [博士论文]. 北京: 清华大学, 2002
- 79 Li Q B, Fu S. Numerical simulation of high-speed planar mixing layer. *Comput. Fluids*, 2003, 32: 1357-1377
- 80 Fu S, Li Q B. Numerical simulation of compressible mixing layers. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 2006, 27: 895-901
- 81 Kerimo J, Girimaji S S. Boltzmann-BGK approach to simulating weakly compressible 2D turbulence: comparison between lattice Boltzmann and gas kinetic methods. *J. Turbulence*, 2007, 8: N 46
- 82 Liao W, Peng Y, Luo L S. Gas-kinetic schemes for direct numerical simulations of compressible homogeneous turbulence. *Phys. Rev. E*, 2009, 80: 046702
- 83 Chit O J, Omar A A, Asrar W. Reynolds averaged Navier-Stokes flow computation of RAE2822 airfoil using gas-kinetic BGK scheme. *IMECS*, Hong Kong, 2009-03-18-20
- 84 李启兵, 符松. BGK 格式与可压缩湍流模拟. 见: 中国力学学会学术大会 2009 论文摘要集. 中国力学学会学术大会, 郑州, 2009
- 85 Li Q B, Tan S, Fu S, et al. Numerical simulation of compressible turbulence with gas-kinetic BGK scheme. In: 13th Asian Congress of Fluid Mechanics, Dhaka, Bangladesh, 2010-12-17-21
- 86 Xiong S W, Zhong C W, Zhou C S, et al. Numerical simulation of compressible turbulent flow via improved gas-kinetic BGK scheme. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 2011, 67: 1833-1847
- 87 李素循. 典型外形高超声速流动特征. 长沙: 国防工业出版社, 2007

- 88 李锦. 气体动理学 BGK 格式研究及其在近连续 - 滑移区域流动中的应用: [硕士论文]. 绵阳: 中国空气动力研究与发展中心, 2012
- 89 Su M D, Yu J D. A parallel large eddy simulation with unstructured meshes applied to turbulent flow around car side mirror. *Comput. Fluids*, 2011, 55: 24-28
- 90 邓家泉, 谢宇峰, 王现方. 以玻尔兹曼方法模拟潮流. 人民珠江, 2006, 6: 25-28
- 91 Kolobov V I, Arslanbekov R R. Towards adaptive kinetic-fluid simulations of weakly ionized plasmas. *J. Comput. Phys.*, 2012, 231: 839-869
- 92 Li Q B, Xu K, Fu S. A high-order gas-kinetic Navier-Stokes solver. *J. Comput. Phys.*, 2010, 229: 6715-6731
- 93 Yang M, Wang Z J. A parameter-free generalized moment limiter for high-order methods on unstructured grids, AIAA 2009-605, 47th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including The New Horizons Forum and Aerospace Exposition, Orlando Florida, 2009-01-05-08
- 94 Li Q B, Fu S. On the multidimensional gas-kinetic BGK scheme. *J. Comput. Phys.*, 2006, 220(532):
- 95 Ren Y X, Sun Y T. A multi-dimensional upwind scheme for solving Euler and Navier-Stokes equations. *J. Comput. Phys.*, 2006, 219: 391-403
- 96 Li Q B, Xu K, Fu S. A new high-order multidimensional scheme. In: 6th International Conference on Computational Fluid Dynamics, St. Petersburg, Russia, 2010-07-12-16
- 97 Fan J, Shen C. Statistical simulation of low-speed rarefied gas flows. *J. Comput. Phys.*, 2001, 167: 393-412
- 98 樊菁, 沈青. 微尺度气体流动. 力学进展, 2002, 32(3): 321-336
- 99 李志辉, 张涵信. 稀薄流到连续流的气体运动论统一数值算法初步研究. 空气动力学学报, 2000, 18(3): 252-9
- 100 李志辉. 从稀薄流到连续流的气体运动论统一数值算法研究: [博士论文]. 四川绵阳: 中国空气动力研究与发展中心, 2001
- 101 Xu K, Huang J C. A unified gas-kinetic scheme for continuum and rarefied flows. *J. Comput. Phys.*, 2010, 229: 7747-7764
- 102 Kolobov V I, Arslanbekov R R, Aristov V V, et al. Unified solver for rarefied and continuum flows with adaptive mesh and algorithm refinement. *J. Comput. Phys.*, 2007, 223: 589-608
- 103 Huang J C, Xu K, Yu P B. A unified gas-kinetic scheme for continuum and rarefied flows III: microflow simulations. Preprint, 2012, <http://www.math.ust.hk/makxu/PAPER/unified-microflow.pdf>
- 104 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.*, 2012, 3(3): 662-690
- 105 Wang R J, Xu K. The study of sound wave propagation in rarefied gases using unified gas-kinetic scheme. *Acta Mech. Sin.* 2012, 28(4): 1022-1029
- 106 Chen S Z, Xu K, Li C B, et al. A unified gas kinetic scheme with moving mesh and velocity space adaptation. *J. Comput. Phys.* 2012, 231(20): 6643-6664
- 107 Li J Q, Li Q B, Xu K. Comparison of generalized Riemann solver and the gas-kinetic scheme for inviscid compressible flow simulations. *J. Comput. Phys.*, 2011, 230: 5080-5099

PROGRESS IN GAS-KINETIC SCHEME*

LI Qibing^{1,†} XU Kun²

¹ School of Aerospace, Tsinghua University, Beijing 100084, China

² Department of Mathematics, Hong Kong University of Science and Technology, Kowloon, Hong Kong

Abstract Recent progress in the development of the gas-kinetic scheme is reviewed in this article, with emphasis laid on the construction of high-order-accurate gas-kinetic flux function for the Navier-Stokes equations and the unified gas-kinetic scheme for flow simulations in the entire Knudsen number regimes. A third-order-accurate gas-kinetic scheme is presented through the high-order reconstruction of the initial data and the high-order gas evolution model of the gas distribution function. Different from traditional high-order schemes based on Riemann solution, the new scheme not only takes into account the high-order initial reconstruction at a cell interface, but also follows its time evolution, which ensures a high-order time accurate flux function. This study pioneers a new way to construct high accurate time-space coupling CFD method. The unified gas-kinetic scheme for arbitrary Knudsen number is developed by direct solving the Boltzmann model equation in the discrete velocity space, where the update of both macroscopic conservative variables and microscopic gas distribution function takes place simultaneously within a time step. The newly developed method is more efficient than existing DVMs, where the continuum flow limit can be easily obtained in the unified scheme due to its hydrodynamic scale part of the flux function. The importance of using a valid physical evolution model in the construction of a numerical method is also discussed. The good performance of gas-kinetic scheme comes mainly from its capability of capturing a rational gas evolution process from an initial discontinuity using gas-kinetic model. The coupling of particle free transport and collision plays an important role here. Through the analysis of dissipative mechanism inside a numerical shock layer, it is realized that the adoption of exact Riemann solution of the Euler equations as a foundation of modern compressible CFD methods has fundamental flaws, and the shock instability at high Mach number simulation is unavoidable. The gas-kinetic scheme follows a valid physical process in the construction of numerical shock structure.

Keywords gas-kinetic theory, high-order-accurate gas-kinetic scheme, unified gas-kinetic scheme, BGK equation



李启兵, 男, 1973 年生, 四川大竹人。1997 年、2002 年先后获得清华大学工程力学学士和流体力学博士学位。2004 年博士后出站后任清华大学航天航空学院助理研究员, 2008 年晋升为副教授。《计算力学学报》编委。主要研究方向为新型计算流体力学方法以及可压缩湍流等多种流动问题的数值模拟。

* The project was supported by the National Natural Science Foundation of China (10872112, 11172154) and Hong Kong Research Grant Council (621709, 621011).

† E-mail: lqb@tsinghua.edu.cn