基于通量重构方法的高精度湍流模拟研究

1. 绪论
   1. 研究背景和意义

计算机的发明是上个世纪最重要的科技成果之一。1965年，摩尔提出了以他名字命名的著名定律，即计算机的计算能力每18到24个月就能提升一倍，这一定律至今仍未失效。计算机所带来的计算能力的巨大提升大大拓展了流体力学的研究方向。除了传统的理论分析和实验研究之外，计算流体力学在Lax、Wendroff、Godunov等先驱的努力下得以建立，并在随后的数十年中迅速发展。究其定义，计算流体力学指的是采用计算机模拟的手段，数值求解纳维-斯托克斯（Navier-Stokes）方程等控制方程，从而得到流动问题的解。到上世纪末，基于二阶精度有限体积法的计算流体力学软件已成功应用到包括汽车、航空、航天等工程领域。

进入二十一世纪以来，超级计算机的出现再一次推动了计算流体力学的发展。在硬件上，多核心处理器技术、高速网络技术和计算节点集群的建立是超级计算机的核心；在软件上，进程间通信框架（MPI）、共享内存计算框架（OpenMP）等的出现成为了编写并行计算流体力学程序的基石。通过使用大量的计算核心并行计算，求解流体力学问题的效率得到了成百上千倍的提升。从另一方面来说，对于之前无法进行计算的大规模复杂流动问题，现在也有了可以进行计算的软硬件平台。

硬件技术的发展也对计算流体力学的算法设计提出了新的要求。对于复杂的湍流流动而言，传统的低精度有限体积法需要高密度的计算网格，计算代价仍然很大。另一方面，现有的大部分有限体积法软件是基于结构网格的，用于复杂工程流动时需要花费大量的人力成本划分网格。因此，发展基于非结构网格的高精度湍流模拟方法能有效地解决这些问题。

* 1. 研究内容与现状

现有的商业计算流体力学软件，包括FLUENT、CFX等，大多采用二阶有限体积法进行计算。这一类方法形式上较为简单，且可以用于结构和非结构网格。经过数十年发展，包括激波捕捉、隐式时间推进、收敛加速等问题已得到了较好的解决。因此，这些计算流体力学软件被广泛应用在诸多工程领域。

常见的工程流体力学问题，包括航空、汽车等行业在内，大多处于湍流流动状态。对于气动升力、阻力等计算，工程上更关心时间平均的流动情况，因此，雷诺平均的纳维-斯托克斯方程（RANS）得到了广泛的应用。这一方程通过引入平均算子，避免了求解非定常纳维-斯托克斯方程的高成本，但同时也引入了被称为雷诺应力的新未知量，从而导致方程不封闭。为此，工程上常采用被称为“湍流模型”的近似方法，将雷诺应力与平均流动相联系，从而使方程封闭。这些方法得到了广泛的应用，在附着边界层流动主导的问题中也取得了相当令人满意的结果。

然而，这一类方法仍然有其很大的局限性。例如，气动声学、气动弹性和激波边界层干扰等涉及非定常复杂流动的问题需要误差足够小的流场计算结果。一方面，若采用二阶有限体积法达到足够小的计算误差，需要非常密集的计算网格，计算代价仍然很大；另一方面，RANS方法由于引入了平均过程，丢失了湍流本身的非定常信息。为解决这两个问题，高精度湍流模拟方法应运而生。

1.2.1 高精度计算流体力学方法

一般而言，任何高于二阶的计算流体力学方法都可以被称为高精度方法，以示其与传统方法的区别。在相同的计算自由度上，高精度方法可以获得比传统二阶方法更小的计算误差；而达到相同的计算误差，高精度方法所需要的计算自由度数小于传统二阶方法。因此，从这种定义上来说，高精度方法的计算效率要高于二阶方法。

早在上世纪八十年代，结构网格上的高精度方法就已经开始研究。高精度有限差分法（FDM）便是其中最著名的一类成果。通过引入更多的模板点，高精度有限差分法理论上可以达到无穷阶精度，但付出的代价是边界条件的处理变得更为困难。此外，有限差分法的数值格式需要沿着网格线方向进行构造，这也就意味着它只能适用于结构网格，从而限制了其对于复杂工程外形的适应能力。

高精度有限体积法（FVM）是另一类高精度方法。和有限差分法类似，高精度有限体积法也需要引入诸多模板点，从而在当前单元内重构出高次多项式分布。由于模板点不再需要沿着网格线选取，有限体积法可以同时适用于结构和非结构网格。它最大的优点是可以继承二阶有限体积法的诸多成熟结果，可以在现有软件的基础上发展；但它也存在着一些缺陷，包括模板点扩充带来的边界条件处理困难、单元内高斯积分带来的巨大计算量等。

有限单元法（FEM）也是一种常见的计算方法。在流体力学上，由于纳维-斯托克斯方程本身的双曲性，一般的连续有限单元法不能保证计算稳定。Shu和Cockburn在XX年将先前应用于中子输运方程的间断伽辽金（Discontinuous Galerkin, DG）有限单元法引入计算流体力学中，并成功证明了其稳定性、收敛性等问题。间断伽辽金方法结合了有限体积法和有限单元法。在单元内部，通过一系列自由度和基函数，可以构造出高次多项式分布，从而获得高精度；而在单元界面上，采用类似有限体积法的黎曼求解器计算单元之间的通量，从而确保方程求解的守恒性。相比于高精度有限体积法，此类方法模板更紧致，仅使用一层相邻单元，使得边界条件处理更简便。然而，由于单元内多个自由度相互耦合，间断伽辽金方法不可避免地需要高斯积分和矩阵求逆，因此计算量上相对高精度有限体积法并无优势。

通量重构方法可以视为间断伽辽金方法的一种改进，最早由Huynh在XX年提出。和间断伽辽金方法类似，它在单元内采用节点的变量值作为自由度，并使用拉格朗日基函数。不同的是，它将单元内部的重构的通量多项式视为假设值，而将单元界面上的通量影响作为修正引入到各个节点上，从而获得正确的节点通量值。这一方法避免了数值积分，显著减小了计算量，同时精度与间断伽辽金方法相当。

此外，谱方法（Spectral Method）、谱元法（Spectral Element Method）、谱体积法（Spectral Volume Method）和谱差分法（Spectral Difference Method）也是常见的高精度计算流体力学方法。但这些方法或存在对网格结构的限制，或存在数值稳定性的一些缺陷，适应性上不如通量重构方法。

1.2.2 湍流模拟方法

如上所述，RANS在一些工程领域取得了巨大的成功，但对于较为复杂的湍流流动处理能力有限。一方面，RANS由于引入了平均算子，无法模拟湍流中的非定常现象；另一方面，由于湍流模型大多针对边界层湍流构造，对于大分离流动的模拟效果往往不佳。因此，复杂湍流需要更先进的方法进行模拟。

直接数值模拟（Direct Numerical Analysis, DNS）是最精细的湍流模拟方法。湍流是典型的多尺度问题，不仅在时间上非定常，而且在空间上存在尺度大小差异极大的不同流动结构。为了计算所有这些结构，最小的计算网格需要达到最小的湍流结构尺度，即柯尔莫哥洛夫尺度（Kolmogorov scale）；而计算域需要达到最大的流动结构尺度，一般而言与流场的几何尺度相当。对均匀湍流而言，这样的网格尺度决定了网格量相当于雷诺数的9/4次方。若雷诺数处于航空上常见的10的5次方量级，则网格量需要达到大约1000亿，这大大超出了目前超级计算机的计算能力。因此，直接数值模拟现阶段仍无法直接应用于工程湍流的模拟。

大涡模拟（Large Eddy Simulation, LES）是直接数值模拟的一种改进。对于雷诺数足够高的均匀湍流而言，存在一个被称为惯性子区的较宽尺度范围。在这个尺度范围内，波数和湍动能能谱分布存在简单的线性关系；而在小于这个尺度的范围内，湍流结构所含的能量小得多。因此，若网格恰好处于这一尺度，则小于网格尺度的湍流结构可能存在普适的模型。计算时，只需要解析大于网格尺度的湍流，而只通过模型考虑亚网格尺度对大尺度的影响。大涡模拟对于各向同性的湍流而言是一种较好的模拟方法。但对于壁面湍流而言，由于壁面约束的存在，使得湍流存在明显的各向异性。其中，垂直于壁面方向的湍流尺度显著小于平行于壁面方向的湍流尺度。大涡模拟需要网格各向同性，因此在壁面附近需要极大的网格量。这也限制了大涡模拟在实际工程中的应用。

为了解决这一问题，学界提出了多种解决方案。Spalart提出的脱体涡模拟（Detached Eddy Simulation，DES）是最著名的一种方法。他将雷诺平均方法和大涡模拟方法相结合，提出了一种两者的混合方法。在壁面附近的附体边界层区域，大涡模拟需要极大的网格量，而雷诺平均方法对此可以很好地处理。在大分离流动区域和远离壁面的区域，雷诺平均方法不能很好地模拟湍流，而大涡模拟能在相对合理的网格量之下解析这些区域的湍流。因此，通过引入适当的混合函数，可以使得模型自动根据流动、网格和几何信息判断使用何种方法，并在两者之间形成光滑过渡。形式上，脱体涡模拟常基于雷诺平均方程进行少量修改而成，一般采用在湍流模型方程中引入替换长度尺度的方法进行。

脱体涡模拟在适当的网格划分之下可以很好地模拟包含分离区域的复杂湍流，但随着研究的进一步深入，它的一些弊端逐步凸显。首先，由于在混合函数中直接采用了壁面距离和网格尺度的比较，导致流向网格比较密时会在附体边界层内不正确地切换到大涡模拟，而此时网格密度又不足以达到惯性子区，因而无法正确计算边界层内的湍流，从而形成所谓“网格诱导分离”。另一方面，在边界层内法向网格过密时，在边界层较外侧的对数区也可能发生不正确的切换，从而产生“对数区不匹配”。为此，脱体涡模拟出现了多个改进版本，分别被称为“延迟脱体涡模拟（Delayed Detached Eddy Simulation, DDES）”和“改进的延迟脱体涡模拟（Improved Delayed Detached Eddy Simulation, IDDES）”。这些方法可以解决上述问题，但仍然无法解决从雷诺平均转换到大涡模拟时产生的“灰区（Grey Area）”问题。

改进大涡模拟的另一大类方法被称为壁面模型（Wall Model）。壁面模型通过在壁面附近引入额外信息，降低了大涡模拟在壁面附近的网格要求。常见的壁面模型有三类：（1）根据距壁面一定距离处的流动信息，在壁面上指定切应力，从而可以用较稀疏的网格计算正确的切应力；（2）在壁面附近采用嵌套的网格，利用稀疏网格上的大涡模拟获取信息，求解雷诺平均方程，并将信息返回给大涡模拟；（3）在壁面附近引入涡粘系数，近似采用雷诺平均方法模拟壁面附近的湍流。

* 1. 存在的问题和本文研究目标

直接数值模拟由于其对于计算精度的需求，天然地适合采用高精度计算方法。由于计算的几何外形一般较为简单，如边界层、槽道等，因此常采用高精度有限差分方法。李新亮等[]在高超声速边界层湍流上的直接数值模拟就是其中具有代表性的工作。

由于脱体涡模拟常采用对雷诺平均方程进行修改的方法实现，数值方法上也往往沿用了雷诺平均常用的二阶有限体积法。为了避免数值精度过低对于大涡模拟区域的影响，需要采用某些提高数值分辨率的方法，如自适应降低数值耗散[]、提高插值阶数[]等。

另一方面，间断伽辽金、高阶有限体积法和通量重构等新型高精度数值方法已经在简单流动上证明了其可靠性和效率。但对于复杂的湍流流动，这些方法尚未得到充分的应用。

本文的研究目标是研究高精度通量重构方法在复杂湍流流动上的应用。主要研究的问题包括探索基于通量重构方法的大涡模拟，以及高精度通量重构方法在流动转捩问题上的模拟应用。

1. 通量重构方法

2.1 高精度通量重构方法概述

高精度通量重构方法（Flux Reconstruction, FR）最早由Huynh[]提出，应用于一维双曲守恒律方程，并可以通过张量积的形式拓展到二维矩形和三维立方体网格上。Wang等人[]将其拓展到了各种包括三角形、四面体在内的多种网格上，并将其重新命名为局部分布罚函数（Local Collocation Penalty, LCP）或者重构-修正过程（Correction Procedure via Reconstruction, CPR）。本文中，为了与其他文献中尽可能保持一致，统一将这一方法称为通量重构方法。

如上文所述，通量重构方法相对于间断伽辽金方法具有计算量较小的优点。此外，通过调整方法中的一些系数，通量重构方法可以获得等价于间断伽辽金法、谱体积法、谱差分法等多种其他方法的数值格式，可以视为这些方法的一种统一框架。

与间断伽辽金法类似，通量重构方法同样在计算单元内部引入多个计算自由度，即通过内点提高计算精度。但不同点在于，间断伽辽金法常采用正交多项式作为基函数，而通量重构方法一般采用拉格朗日多项式作为基函数。这样，可以直接取节点处的物理量值作为单元内的自由度，获取单元内的物理量值也变得更简单。理论上，通过构造任意次多项式分布，可以使计算精度达到任意阶。本文中一般采用三阶或四阶精度的通量重构法，以在计算量和计算误差之间取得平衡。

通过单元内的物理量分布，可以重构出对应的通量分布多项式。理论上，可以直接采用这一通量分布获取物理量对时间的导数，从而构成完整的半离散格式。但我们注意到，重构的通量分布在单元界面两侧不相等，不能保证守恒性，也无法受到相邻单元的影响。因此，需要在单元界面上采用黎曼求解器，计算出守恒通量，并将其与本单元重构通量的差值作为基准，修正本单元内的通量分布。由于只需要一层相邻单元的信息，通量重构方法具有良好的紧致性，在边界条件处理上一般不需要引入虚拟网格，从而简化了程序设计，降低了并行计算带来的额外负担。

2.2 通量重构方法的数学推导

本节以双曲守恒律形式的微分方程为例，推导通量重构方法的具体格式。方程的形式如下：



其中U称为守恒变量，F称为通量。重构修正过程作为一种有限单元法，首先将方程在单元内进行加权积分，获得其弱形式：



其中W是权函数，Vi是当前计算单元。积分形式的第二项具有权函数和通量散度乘积的形式，可以采用分部积分和高斯公式，得到如下形式：



其中∂Vi是当前单元的边界，n是单元的外法向量。通量重构方法在单元内用不高于k次的多项式近似U的分布：



单元内的多项式分布用节点处的变量值和拉格朗日插值函数构造。在通量重构方法中，这些节点被称为求解点（Solution Points, SP）。方程第二项是一个单元界面上的面积分项，为满足有限单元法的要求，同样将其用拉格朗日多项式近似构造，对应的通量计算点称为通量点（Flux Points, FP）。注意到界面两侧的两个单元各自独立插值可以得到间断的界面通量值，因此这一积分不能直接进行计算，而需要采用黎曼求解器引入相邻单元的影响：



其中，下标com表示单元界面的连续通量，下标i+表示相邻单元。将此式代入上式，并对第三项再次使用分部积分和高斯公式，可以得到：



至此，所有的权函数W均以不含导数算子的形式出现，且仅有第二项是面积分形式。只需要设法将其转变成体积分形式，即可消去W，获得微分形式的求解格式。为此，引入提升算子（Lift Operator）δ，使其满足以下条件：



其中表示连续通量与当地通量之间的差值。为了满足有限单元法的构造要求，提升算子同样采用求解点上的拉格朗日插值多项式表示。由此，求解形式可以写成：



考虑到加权函数W的任意性，最终可以获得微分形式的求解格式：



对线性守恒律，这一半离散微分格式可直接用于求解。对于非线性守恒律，由于F和U的非线性关系，散度项一般不在相应的多项式空间里，因此需要进行一次投影：



选定了多项式基和权函数W，可以通过此时数值积分求解出精确的投影算子，但这样做无法体现出通量重构方法不需要数值积分的优势。因此，一般采用以下两种方式进行投影算子计算：

1. 拉格朗日多项式（Lagrange Polynomial, LP）:



1. 链式规则（Chain Rule, CR）:



这两种方法均可保证计算精度。区别在于，拉格朗日多项式可以保证完全守恒，但数值稳定性稍差；链式规则会带来微小的守恒性误差，但数值稳定性更好，而且能获得更小的绝对误差值。

理论上，求解点、通量点和提升算子均可任意选取。XX已证明，对一维线性守恒律而言，求解的精度与求解点的选取无关。为保证对非线性守恒率的计算精度，一般选取洛巴托积分点（Lobatto Points）或高斯积分点（Gauss Points）作为求解点和通量点。

提升算子的形式直接取决于权函数的选择，可以通过其定义式解析求出，一般可以写成各个通量点上通量差的线性组合，具有如下形式：



其中，下标j表示j号求解点，下标f表示单元界面f，下标m表示此单元界面上的m号通量点，α表示线性组合系数，只取决于单元的类型、求解点和通量点的选取，以及权函数的选择，与单元的几何坐标无关。因此，在程序实现中，可以按照每种单元类型，以常数的形式保存这些系数。

通过选取不同的权函数，通量重构方法可以获得等价于其他高阶方法的格式。例如，若取权函数和基函数相等，则等价于间断伽辽金方法；若取分片权函数，则等价于谱体积方法。

2.3 粘性项的计算

纳维-斯托克斯方程不仅有双曲型的对流通量，还有椭圆型的粘性通量。粘性通量是二阶导数项，无法直接采用上节中描述的方法求解。在传统的二阶有限体积法中，一般采用界面左右平均的形式对其进行计算。然而Cockburn[]指出，在有限单元法中，直接采用左右平均值进行计算会得到错误的解。因此，本节将详细介绍通量重构方法中粘性项的计算方法。

为了计算二阶导数，首先引入额外的方程：



其中R可以视为修正的梯度。对这一方程，同样可以采用上述的通量重构方法进行计算，包括本单元内的重构、单元界面值的计算以及修正过程。注意到在这一方程中的“通量”即为守恒变量。因此，构造粘性项格式时总计有三组量需要计算：本单元内的梯度、单元界面上的守恒变量值以及单元界面上的梯度值。由于二阶导数的存在，直接构造这一额外方程的计算格式会引入第二层相邻单元的信息，从而破坏通量重构方法的紧致型。

纳维-斯托克斯方程的粘性项具有中心性，因此数值格式的设计上也应当体现这一特点。为此，本文采用Bassi-Rebay 2格式，其表达式如下：



其中，上标+和-表示不同界面两侧单元，上标com表示单元两侧的连续量，下标l表示单元内求解点的编号，r表示梯度的修正量。这一格式具有完全对称的性质，符合粘性项的中心性特点。同时，这一格式仅用到了本单元和相邻单元的信息，保持了通量重构方法的紧致型。梯度修正的系数与通量修正的系数相同，也降低了额外存储的需求。

2.4 曲边网格处理

传统的二阶有限体积法采用的是直边网格，在边界上，将其离散成分片平面拼接而成的外形。然而，直接将这种网格应用于高精度通量重构方法会带来诸多问题。首先，通量重构方法由于在单元内引入了多个自由度，采用的网格相对稀疏，这样的分片平面离散会带来几何误差；其次，由于计算格式中显式出现了法向量和面积这些变量，几何误差会直接体现在计算误差中，甚至可能出现几何误差占主导的情况，导致计算无法体现高精度特点。所以，在高阶通量重构的计算中，需要使用曲边网格，对边界采用分片二次曲面甚至高次曲面进行近似。

下图是二维无粘圆柱绕流的算例。其中，左图为