计算流体力学

Computational Fluid Dynamics

作者：Koishi

时间：October 29, 2024

ElegantLaTeX Program

CFD is the art of replacing the PDE by algebraic equations.

目录

第 1 章 对流项格式

1.1 局部坐标法

参考计算流体力学——从原理到算法（七）：可压缩无粘流的计算方法（3）高维 Euler 方程。首先考虑二维守恒型 Euler 方程：

$$\frac{\partial \vec{W}}{\partial t}+\frac{\partial \vec{F}(\vec{W})}{\partial x}+\frac{\partial \vec{G}(\vec{W})}{\partial y}=\vec{0}$$

其中

$$\vec{W}=\begin{bmatrix}\rho\\ \rho u\\ \rho v\\ \rho E\end{bmatrix},\quad \vec{F}(\vec{W})=\begin{bmatrix}\rho u\\ \rho u^2+p\\ \rho uv\\ (\rho E+p)u\end{bmatrix},\quad \vec{G}(\vec{W})=\begin{bmatrix}\rho v\\ \rho uv\\ \rho v^2+p\\ (\rho E+p)v\end{bmatrix}$$

在有限体积框架下，考虑某一控制体 Ω ，其表面的单位外法向量记为 $\vec{n}=(n_x,n_y)^T$ ，那么 Euler 方程的积分形式为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\Omega}\vec{W}\mathrm{d}\Omega+\int_{\partial\Omega}(\vec{F}(\vec{W})n_x+\vec{G}(\vec{W})n_y)\mathrm{d}S=\vec{0}$$

而进一步的，我们令 $\vec{n}=(n_x,n_y)^T=(\cos\theta,\sin\theta)^T$ ，那么就有 $\vec{F}(\vec{W})n_x+\vec{G}(\vec{W})n_y=\vec{F}(\vec{W})\cos\theta+\vec{G}(\vec{W})\sin\theta$ 。现在考虑在一个旋转后的坐标系下的 Euler 方程，引入旋转矩阵

$$\mathbf{T}=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\ 0&\cos\theta&\sin\theta&0\\ 0&-\sin\theta&\cos\theta&0\\ 0&0&0&1\end{bmatrix},\quad \mathbf{T}^{-1}=\mathbf{T}^{T}=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\ 0&\cos\theta&-\sin\theta&0\\ 0&\sin\theta&\cos\theta&0\\ 0&0&0&1\end{bmatrix}$$

那么就有

$$\mathbf{T}\vec{W}=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\ 0&\cos\theta&\sin\theta&0\\ 0&-\sin\theta&\cos\theta&0\\ 0&0&0&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\rho\\ \rho u\\ \rho v\\ \rho E\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\rho\\ \rho(u\cos\theta+v\sin\theta)\\ \rho(-u\sin\theta+v\cos\theta)\\ \rho E\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\rho\\ \rho\hat{u}\\ \rho\hat{v}\\ \rho E\end{bmatrix}$$

可以发现

$$\begin{aligned}
\mathbf{T}^{-1}\vec{F}(\mathbf{T}\vec{W})&=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\ 0&\cos\theta&-\sin\theta&0\\ 0&\sin\theta&\cos\theta&0\\ 0&0&0&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\rho(u\cos\theta+v\sin\theta)\\ \rho(u\cos\theta+v\sin\theta)^2+p\\ \rho(u\cos\theta+v\sin\theta)(-u\sin\theta+v\cos\theta)\\ (\rho E+p)(u\cos\theta+v\sin\theta)\end{bmatrix}\\
&=\begin{bmatrix}\rho(u\cos\theta+v\sin\theta)\\ \cos\theta\left[\rho(u^2+v^2+2uv\cos\theta\sin\theta)+p\right]-\sin\theta\left[\rho(-u^2\cos\theta\sin\theta-uv\sin^2\theta+uv\cos^2\theta+v^2\cos\theta\sin\theta)\right]\\ \sin\theta\left[\rho(u^2+v^2+2uv\cos\theta\sin\theta)+p\right]+\cos\theta\left[\rho(-u^2\cos\theta\sin\theta-uv\sin^2\theta+uv\cos^2\theta+v^2\cos\theta\sin\theta)\right]\\ (\rho E+p)(u\cos\theta+v\sin\theta)\end{bmatrix}\\
&=\begin{bmatrix}\cos\theta\rho u+\sin\theta\rho v\\ \cos\theta(\rho u^2+p)+\sin\theta(\rho uv)\\ \cos\theta(\rho uv)+\sin\theta(\rho v^2+p)\\ \cos\theta(\rho E+p)u+\sin\theta(\rho E+p)v\end{bmatrix}=\vec{F}(\vec{W})\cos\theta+\vec{G}(\vec{W})\sin\theta
\end{aligned}$$

这也就意味着

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\Omega}\vec{W}\mathrm{d}\Omega+\int_{\partial\Omega}(\vec{F}(\vec{W})n_x+\vec{G}(\vec{W})n_y)\mathrm{d}S=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\Omega}\vec{W}\mathrm{d}\Omega+\int_{\partial\Omega}\mathbf{T}^{-1}\vec{F}(\mathbf{T}\vec{W})\mathrm{d}S=\vec{0}$$

也就是说，$\vec{n}$ 方向的通量在 $x-y$ 坐标系下的表达式，等于以 $\vec{n}$ 为横轴的局部坐标系 $x'-y'$ 方向中的 x' 方向通量进行旋转逆变换后的值。利用这一性质，我们可以得到二维问题任意控制体中数值通量的计算方法。

考虑一个网格单元 Ω_i ，其半离散的有限体积法可以写为

$$\frac{\partial\vec{W}_i}{\partial t}+\frac{1}{\Omega_i}\sum_{j\in N(i)}\vec{H}_{ij}=\vec{0}$$

根据 Euler 方程的旋转不变性，数值通量为

$$\vec{H}_{ij}=\left[n_x\vec{F}(\vec{W})+n_y\vec{G}(\vec{W})\right]_{ij}\Delta S_{ij}=\mathbf{T}_{ij}^{-1}\vec{F}(\mathbf{T}_{ij}\vec{W}_{ij})\Delta S_{ij}$$

其中 $\mathbf{T}_{ij}$ 表示界面 ij 的法向量对应的旋转矩阵。由上式，有限体积格式可以改写为

$$\frac{\partial\vec{W}_i}{\partial t}+\frac{1}{\Omega_i}\sum_{j\in N(i)}\mathbf{T}^{-1}\hat{\vec{F}}_{ij}\Delta S_{ij}=\vec{0}$$

其中 $\hat{\vec{F}}_{ij}=\vec{F}(\hat{\vec{W}}_{ij})$ ，且 $\hat{\vec{W}}_{ij}=\mathbf{T}_{ij}\mathbf{W}_{ij}$ 表示 ij 界面中点处的 $x'-y'$ 坐标系中守恒变量的值。显然，在有限体积法中，为了计算数值通量 $\vec{H}_{ij}$ ，只需要计算界面上的 $\hat{\vec{F}}_{ij}=\vec{F}(\hat{\vec{W}}_{ij})$ 。为此，我们在以 $\vec{n}_{ij}$ 为横轴的局部坐标系 $x'-y'$ 中把 Euler 方程写为

$$\frac{\partial\hat{\vec{W}}}{\partial}+\frac{\partial\hat{\vec{F}}}{\partial x'}+\frac{\partial\hat{\vec{G}}}{\partial y'}=\vec{0}$$

进一步，假定在控制体的第 s 个界面处，流动是沿法向局部一维的，从而可以略去 $\frac{\partial\hat{\vec{G}}}{\partial y'}$ 。这样，二维 Euler 方程就可以化简为如下“扩张一维”Euler 方程：

$$\frac{\partial\hat{\vec{W}}}{\partial t}+\frac{\partial\hat{\vec{F}}}{\partial x'}=\vec{0}$$

如此就能够将一维对流格式拓展到多维 Euler 方程的求解。

1.2 AUSMPW+ 格式

参考文献Methods for the Accurate Computations of Hypersonic Flows: I. AUSMPW+Scheme。

1.2.1 AUSM+ 格式的简单回顾

AUSM 类型格式定义了一个网格界面处的对流 Mach 数来确定对流量的迎风插值。尽管使用对流 Mach 数能够在精度上有很大提升，但是其可能引起数值震荡现象。比如，AUSM+ 格式在近壁处和通过激波处会发生震荡。AUSM+ 的网格界面的数值通量在 $m_{1/2}=M_L^{+}+M_R^{-}>0$ 时可以表示为

$$\vec{F}_{\frac{1}{2},AUSM+}=\left(M_L^{+}\big|_{\beta=\frac{1}{8}}+M_R^{-}\big|_{\beta=\frac{1}{8}}\right)c_{\frac{1}{2}}\vec{\psi}_L+\left(P_L^{+}\big|_{\alpha=\frac{3}{16}}\vec{p}_L+P_R^{-}\big|_{\alpha=\frac{3}{16}}\vec{p}_R\right)$$

其中 $\vec{\psi}=(\rho,\rho u,\rho H)^T$ ，$\vec{p}=(0,p,0)^T$ 。下标 $1/2$ 表示网格界面处的量，而 L,R 分别表示位于网格界面左右两侧的量。AUSM+ 在网格界面处的分裂 Mach 数和压强定义为

$$M^{\pm}\big|_{\beta}=\begin{cases}\pm\frac{1}{4}(M\pm1)^2\pm\beta(M^2-1)^2, & |M|\le 1\\ \frac{1}{2}(M\pm|M|), & |M|>1\end{cases}$$

$$P^{\pm}\big|_{\alpha}=\begin{cases}\frac{1}{4}(M\pm1)^2(2\mp M)\pm\alpha M(M^2-1)^2, & |M|\le 1\\ \frac{1}{2}(1\pm\mathrm{sign}(M)), & |M|>1\end{cases}$$

在每一侧的 Mach 数定义为

$$M_{L,R}=\frac{U_{L,R}}{c_{\frac{1}{2}}},\quad c_{1/2}=\min(\tilde{c}_L,\tilde{c}_R)$$

其中 $\tilde{c}=\frac{c^{*2}}{\max(|U|,c^*)}$ ，而 critical speed of sound c^* 则根据等能条件得到为

$$c^*=\sqrt{\frac{2(\gamma-1)}{\gamma+1}H}$$

其中 H 为总焓，U 是沿着网格界面法向的速度分量。

可以看到，AUSM+ 只根据网格界面处的 Mach 数 $m_{1/2}$ 来考虑其中一侧的对流量 $\vec{\psi}$ 。这被认为会引发震荡，因为在亚音速区域只考虑单侧的量对于流动物理来说是不合适的。其他能够在 AUSM 类型格式中经常看到的现象是通过一个激波时的震荡。尽管有着上述仅考虑单侧量的缺陷，AUSM 类型格式借助对流 Mach 数却能够捕捉静止激波或通过单个网格界面的接触不连续。因此，有必要小心地通过两侧量来控制 AUSM+ 的对流量来消除震荡现象，同时保持 AUSM+ 在精度、效率和鲁棒性的优势。

1.2.2 AUSMPW 格式概述

AUSMPW(AUSM by Pressure-Based Weight Function) 格式最主要的特性就是通过引入了基于压强的权重函数消除了 AUSM+ 在近壁面和强激波处的震荡现象。AUSMPW 使用基于压强的权重函数 f 来处理近壁面的震荡，使用 w 来消除强激波处的震荡。AUSMPW 的设计启发点在于 AUSM+ 和 AUSMD 两个格式是互补的，AUSM+ 没有 carbuncle 现象，但在近壁处存在数值震荡；而 AUSMD 在近壁处没有数值震荡，但存在 carbuncle 现象。这个区别可以在它们的质量通量的形式中看到：

$$\begin{aligned}\rho u_{\frac{1}{2},AUSM+}&=M_L^+c_{\frac{1}{2}}\rho_L+M_R^-c_{\frac{1}{2}}\rho_L,\quad m_{\frac{1}{2}}\geq 0\\ \rho u_{\frac{1}{2},AUSMD}&=M_L^+c_{\frac{1}{2}}\rho_L+M_R^-c_{\frac{1}{2}}\rho_R,\quad \rho m_{\frac{1}{2}}\geq 0\end{aligned}$$

其中 $m_{1/2}=M_L^++M_R^-$ ，$\rho m_{1/2}=\rho_L M_L^++\rho_R M_R^-$ 。

根据上面两个式子，可以看到 AUSM+ 只考虑了左单元的密度，而 AUSMD 考虑了两个单元的密度。这可以认为是 AUSM+ 的数值震荡现象以及 AUSMD 的 carbuncle 现象的原因。为了融合 AUSM+ 和 AUSMD 的优势，在 AUSM+ 的质量通表达式的第二项上乘以一个密度比例，得到

$$\rho u_{\frac{1}{2},AUSMPW}=M_L^+c_{\frac{1}{2}}\rho_L+M_R^-c_{\frac{1}{2}}\rho_L\left(\frac{\rho_R}{\rho_L}\right)$$

根据使用声速表达的状态方程，密度可以表达为

$$\rho=\gamma\frac{p}{c^2}$$

如果在网格界面处的比热比以及声速被确定下来，那么就有

$$\rho u_{\frac{1}{2},AUSMPW}=M_L^+c_{\frac{1}{2}}\rho_L+M_R^-c_{\frac{1}{2}}\rho_L\frac{\gamma_s\frac{p_R}{c_s^2}}{\gamma_s\frac{p_L}{c_s^2}}=M_L^+c_{\frac{1}{2}}\rho_L+\frac{p_R}{p_L}M_R^-c_{\frac{1}{2}}\rho_L$$

通过引入 p_R/p_L ，AUSMPW 考虑了右网格的压强特性，这能够避免在近壁处的数值震荡。为了得到对称的表达，上式被改写为

$$\rho u_{\frac{1}{2},AUSMPW}=\frac{p_L}{p_s}M_L^+c_{\frac{1}{2}}\rho_L+\frac{p_R}{p_s}M_R^-c_{\frac{1}{2}}\rho_L$$

或者

$$\begin{aligned}\rho u_{\frac{1}{2},AUSMPW}&=\left(M_L^+c_{\frac{1}{2}}\rho_L+M_R^-c_{\frac{1}{2}}\rho_L\right)_{AUSM+}+\left(\frac{p_L}{p_s}-1\right)M_L^+c_{\frac{1}{2}}\rho_L+\left(\frac{p_R}{p_s}-1\right)M_R^-c_{\frac{1}{2}}\rho_L\\ &=\left(M_L^+c_{\frac{1}{2}}\rho_L+M_R^-c_{\frac{1}{2}}\rho_L\right)_{AUSM+}+f_LM_L^+c_{\frac{1}{2}}\rho_L+f_RM_R^-c_{\frac{1}{2}}\rho_L\end{aligned}$$

其中

$$f_{L,R}=\begin{cases}\frac{p_{L,R}}{p_s}-1, & |M_{L,R}|<1,\quad p_s\neq 0\\ 0, & \text{elsewhere}\end{cases},\qquad p_s=P_L^+\big|_{\alpha=\frac{3}{16}}p_L+P_R^-\big|_{\alpha=\frac{3}{16}}p_R$$

在超声速区域中 $f_{L,R}=0$ ，上式就恢复到了 AUSM+ 的形式。对 p_s 的选择避免了 $f_{L,R}$ 在激波处的干涉，同时保持了 p_s 随着 Mach 数渐进趋于零时的对称性和连续变化。尽管上面的修正通量在近壁处不会出现震荡，但是其精度有所损失，尤其在边界层和激波区域 $f_LM_L^++f_RM_R^-$ 的增加使精度问题更为显著。例如，当 Mach 数

从 0 增大到 1，根据定义 M_L^+ 并没有变为零，因此 $f_L M_L^+$ 在边界层或激波区域仍然起作用并提供了额外的数值粘性。另一个副作用是，它有可能引发激波不稳定并导致 carbuncle 现象，因为该通量中含有与压强差成比例的数值耗散项。这些问题可以通过限制 $f_{L,R}$ 来解决：

$$f_{L,R} = \begin{cases} \left(\frac{p_{L,R}}{p_s} - 1\right) pl(p_{L,R}, p_{R,L}) \left| M_{L,R}^{\pm}\big|_{\beta=0} \right| \times \min\left(1, \left(\frac{|\vec{U}_{L,R}|}{c_{1/2}}\right)^{0.25}\right), & |M_{L,R}| \le 1 \\ 0, & |M_{L,R}| > 1 \end{cases}$$

其中

$$pl(x,y) = \begin{cases} 4 \times \min\left(\frac{x}{y}, \frac{y}{x}\right) - 3, & \frac{3}{4} \le \min\left(\frac{x}{y}, \frac{y}{x}\right) < 1 \\ 0, & 0 \le \min\left(\frac{x}{y}, \frac{y}{x}\right) < \frac{3}{4} \end{cases}$$

另外，在激波附近和 stiff gradient 的区域也需要检查。AUSM+ 格式根据网格界面处的 Mach 数的符号来考虑一侧的量，这可能会产生过多或过少的数值通量，尤其在网格系统与激波没有对齐的情况，从而产生流场量的震荡。在 AUSMPW，网格界面两侧的量都通过另一个基于压强的权重函数 w 考虑进来：

$$\rho u_{\frac{1}{2},AUSMPW} = (1+f_L) M_L^+\big|_{\beta=\frac{1}{8}} c_{\frac{1}{2}} \rho_L + (1+f_R) M_R^-\big|_{\beta=\frac{1}{8}} c_{\frac{1}{2}} \left((1-w)\rho_L + w\rho_R\right)$$

其中

$$w(p_L, p_R) = 1 - \min\left(\frac{p_L}{p_R}, \frac{p_R}{p_L}\right)^3$$

从 w 的形式可以发现，w 值在除了激波不连续区域外的地方都非常小。

总结下来，AUSMPW 的数值通量可以写为

$$\vec{F}_{\frac{1}{2}} = \bar{M}_L^+ c_{\frac{1}{2}} \vec{\psi}_L + \bar{M}_R^- c_{\frac{1}{2}} \vec{\psi}_R + \left(P_L^+\big|_{\alpha=\frac{3}{16}} \vec{p}_L + P_R^-\big|_{\alpha=\frac{3}{16}} \vec{p}_R\right)$$

其中当 $m_{1/2} = M_L^+ + M_R^- \ge 0$ 时，有

$$\bar{M}_L^+ = M_L^+\big|_{\beta=\frac{1}{8}} + M_R^-\big|_{\beta=\frac{1}{8}} - M_R^-\big|_{\beta=\frac{1}{8}} \times w(1+f_R) + \left(f_L M_L^+\big|_{\beta=\frac{1}{8}} + f_R M_R^-\big|_{\beta=\frac{1}{8}}\right)$$

$$\bar{M}_R^- = M_R^-\big|_{\beta=\frac{1}{8}} \times w(1+f_R)$$

而当 $m_{1/2} = M_L^+ + M_R^- < 0$ 时，有

$$\bar{M}_L^+ = M_L^+\big|_{\beta=\frac{1}{8}} \times w(1+f_L)$$

$$\bar{M}_R^- = M_L^+\big|_{\beta=\frac{1}{8}} + M_R^-\big|_{\beta=\frac{1}{8}} - M_L^+\big|_{\beta=\frac{1}{8}} \times w(1+f_L) + \left(f_L M_L^+\big|_{\beta=\frac{1}{8}} + f_R M_R^-\big|_{\beta=\frac{1}{8}}\right)$$

其中 $\vec{\psi} = (\rho, \rho u, \rho H)^T$ ，$\vec{p} = (0, p, 0)^T$ 。AUSMPW 在网格界面处采用的分裂 Mach 数和压强与 AUSM+ 的处理方式一致。

1.2.3 AUSMPW+ 格式：AUSMPW 的改进版本

在前面的部分提到，$f_L M_L^+|_{\beta=1/8} + f_R M_R^-|_{\beta=1/8}$ 设计来消除近壁处的震荡，而 $M_R^-|_{\beta=1/8} \times w(1+f_R)$ 或者 $M_L^+|_{\beta=1/8} \times w(1+f_L)$ 用来消除强激波后的过冲或震荡。为了保持与 AUSM+ 相同的精度同时消除引发 carbuncle 现象的激波不稳定，引入了 $pl(p_{L,p_R}) \times |M_{L,R}^{\pm}|_{\beta=0}| \times \min\left(1, (\vec{U}_{L,R}/c_{1/2})^{0.25}\right)$ 作为某种函数 $f_{L,R}$ 的限制器，从而控制 $f_L M_L^+ + f_R M_R^-$ 的大小。如果没有这个额外的限制项，数值耗散项 $f_L M_L^+ + f_R M_R^-$ 可能会变得非常大，尤其在超声速边界层的情况，因为 M_L^+ 和 M_R^- 有着显著差异，而耗散增大将会直接影响敏感的空气动力学参数，比如表面的传热系数。除此之外，这还会在捕捉激波时对精度造成不良影响，因为 $f_L M_L^+ + f_R M_R^-$ 有着与其他耗散项同阶的大小。项 $M_{L,R}^{\pm}\big|_{\beta=0}$ 设计来降低 $f_{L,R}$ 的大小，而 $\min\left(1, (|\vec{U}_{L,R}|/c_{1/2})^{0.25}\right)$ 使得 $f_{L,R}$ 在停止流动的区域消失。函数 $ol(p_L, p_R)$ 设计来让 $f_{L,R}$ 在大压强梯度的区域变为零。

尽管 AUSMPW 有着一些优点，但是它有着一个非常复杂的函数 $f_{L,R}$ ，这造成额外的计算消耗。因此，在 AUSMPW+ 中将对 $f_{L,R}$ 在精度、激波稳定性和效率方面进行改进。

为了保持解析剪切层与激波的精度，采用如下的估计：

$$M_L^+ \simeq -M_R^-, \quad M \to 0$$

于是当 $m_{1/2}\geq 0$ 时，$f_L M_L^+ + f_R M_R^-$ 变为 $(f_R-f_L)M_R^-$ ，并且它随着 Mach 数减小。这种方式避免了在 $f_{L,R}$ 中使用 $pl(p_L,p_R)\times\left|M_{L,R}^{\pm}|_{\beta=0}\right|\times\min\left(1,(\vec{U}_{L,R}/c_{1/2})^{0.25}\right)$ ，也不会引入过多的数值粘性。但是为了消除 carbuncle 现象，有必要在一个移动的强激波处让 f 变为零。在 AUSMPW+ 中，这通过乘以一个考虑了横向方向的压强的项来实现。最终，AUSMPW+ 可以总结为

$$\vec{F}_{\frac{1}{2}}=\bar{M}_L^+ c_{\frac{1}{2}}\vec{\psi}_L+\bar{M}_R^- c_{\frac{1}{2}}\vec{\psi}_R+\left(P_L^+|_{\alpha=\frac{3}{16}}\vec{p}_L+P_R^-|_{\alpha=\frac{3}{16}}\vec{p}_R\right)$$

其中当 $m_{1/2}\geq 0$ 时，有

$$\begin{aligned}\bar{M}_L^+&=M_L^+ + M_R^-\cdot\left[(1-w)(1+f_R)-f_L\right]\\ \bar{M}_R^-&=M_R^-\cdot w(1+f_R)\end{aligned}$$

当 $m_{1/2}<0$ 时，有

$$\begin{aligned}\bar{M}_L^+&=M_L^+\cdot w(1+f_L)\\ \bar{M}_R^-&=M_R^- + M_L^+\cdot\left[(1-w)(1+f_L)+f_L-f_R\right]\end{aligned}$$

其中

$$w=1-\min\left(\frac{p_L}{p_R},\frac{p_R}{p_L}\right)^3$$

并且 $f_{L,R}$ 被简化为

$$f_{L,R}=\begin{cases}\left(\frac{p_{L,R}}{p_s}-1\right)\min\left(1,\frac{\min(p_{1,L},p_{1,R},p_{2,L},p_{2,R})}{\min(p_L,p_R)}\right)^2, & p_s\neq 0\\ 0, \quad \text{elsewhere}\end{cases}$$

其中 $p_s=P_L^+ p_L+P_R^- p_R$ 。

可以看到函数 w 是压强比值的立方，在除了大梯度区域 (比如激波) 之外的地方值非常小。$f_{L,R}$ 在除了存在震荡的区域之外值也变得非常小。因此，AUSMPW+ 在激波和震荡区域之外的地方有着与 AUSM+ 相同的形式。

AUSMPW+ 在网格界面处的 Mach 数和压强分裂函数也被简化如下：

$$M^{\pm}=\begin{cases}\pm\frac{1}{4}(M\pm 1)^2, & |M|\leq 1\\ \frac{1}{2}(M\pm|M|), & |M|>1\end{cases}$$

$$P^{\pm}|_{\alpha}=\begin{cases}\frac{1}{4}(M\pm 1)^2(2\mp M)\pm\alpha M(M^2-1)^2, & |M|\leq 1\\ \frac{1}{2}(1\pm\mathrm{sign}(M)), & |M|>1\end{cases}$$

其中 $\alpha\in[0,3/16]$ 。当取 $\alpha=0$ 时 AUSMPW+ 在稳定性方面要更加鲁棒，因为压强分裂函数要稍微更加扩散。

在两侧的 Mach 数采用类似的定义：

$$M_{L,R}=\frac{U_{L,R}}{c_{1/2}}$$

但是，AUSMPW+ 的声速 $c_{1/2}$ 的选择则有所不同。

在 AUSM 类型格式中，数值声速的选择是非常重要的，因为它与物理简单地解析紧密地联系。尽管 AUSMPW 使用前面提到的声速表达式能够捕捉通过网格界面的静止正激波，但是斜激波在非对齐网格系统中会被模糊到超过四个网格界面。即使使用接近与激波对齐的网格，斜激波仍然不能在一个网格界面处被捕捉。另外，AUSMPW 采用的声速并不能分辨来自压缩激波的非物理膨胀激波，因此会像 AUSM+ 那样允许不满足熵条件的解。

为了提升捕捉斜激波的能力，并消除非物理的膨胀激波，下面将为 AUSMPW+ 特别设计数值声速。首先，声速根据流动方向来定义以找出让熵下降的膨胀激波。第二，为了准确地捕捉通过一个在激波对齐网格系统中网格界面的静止斜激波，将使用剔除了沿着斜激波方向的切向速度分量的总焓来定义声速。尽管斜激波在激波非对齐网格系统中不能只通过一个网格界面来捕捉，但数值耗散随着被剔除的切向速度分量而降低。因此斜激波可以用下面的形式的声速更精确地捕捉：

$$c_{1/2}=\begin{cases}\frac{c_s^2}{\max(|U_L|,c_s)}, & \frac{1}{2}(U_L+U_R)\geq 0\\ \frac{c_s^2}{\max(|U_R|,c_s)}, & \frac{1}{2}(U_L+U_R)<0\end{cases}$$

根据与斜激波正交方向的守恒定律以及理想热量气体的状态方程，网格界面的法向声速 c_s 为

$$c_s = \sqrt{\frac{2(\gamma-1)}{\gamma+1}H_{normal}}$$

其中

$$H_{normal} = \frac{1}{2}\left(H_{total,L} - \frac{1}{2}V_L^2 + H_{total,R} - \frac{1}{2}V_R^2\right)$$

其中 V_L, V_R 是切向速度分量。然后我们可以看到 c_s 满足通过斜激波的 Prandtl 关系，正如 critical speed of sound 通过一个正激波的情况那样：

$$\frac{U_L}{c_s} \times \frac{U_R}{c_s} = 1$$

1.3 AUSM+up 格式

参考文献A sequel to AUSM, Part II: AUSM+up for all speeds。对于所有 AUSM 类型的格式，无粘通量都被显式地分解为对流通量和压强通量：

$$\vec{F} = \vec{F}^{(c)} + \vec{P} = \dot{m}\vec{\psi} + \vec{P}$$

其中

$$\dot{m} = \rho u, \quad \vec{\psi} = (1, u, H)^T, \quad \vec{P} = (0, p, 0)^T$$

显然可以构造一个数值通量满足如下的形式：

$$\vec{f}_{1/2} = \dot{m}_{1/2}\vec{\psi}_{L/R} + \vec{p}_{1/2}$$

其中 $\vec{\psi}_{L/R}$ 将简单地通过迎风方法确定：

$$\vec{\psi}_{L/R} = \begin{cases} \vec{\psi}_L, & \dot{m}_{1/2} \geq 0 \\ \vec{\psi}_R, & \dot{m}_{1/2} < 0 \end{cases}$$

显然，构造该数值通量的主要工作就是定义出质量通量 $\dot{m}_{1/2}$ 和压强通量 $\vec{p}_{1/2}$ ，下面将分别详细地进行阐述。

1.3.1 质量通量

网格界面的质量通量表示为

$$\dot{m}_{1/2} = u_{1/2}\rho_{L/R} = a_{1/2}M_{1/2}\rho_{L/R}$$

其中 $u_{1/2}$ 是对流速度，$\rho_{L/R}$ 是通过 $u_{1/2}$ 对流输运的密度。下标 L 和 R 分别表示网格界面左侧和右侧的值。由于对流通量与守恒定律方程组的线性场有关，网格界面的密度可以根据 $u_{1/2}$ 的方向以迎风方法得到，即

$$\rho_{L/R} = \begin{cases} \rho_L, & u_{1/2} \geq 0 \\ \rho_R, & u_{1/2} < 0 \end{cases}$$

事实上，使用 Mach 数作为主要变量会更加方便，而 $u_{1/2}$ 将会通过特征值 $M \pm 1$ 的多项式函数[1]来表达出来。因此，将质量通量的表达式改写为

$$\dot{m}_{1/2} = a_{1/2}M_{1/2}\rho_{L/R}$$

此时

$$\rho_{L/R} = \begin{cases} \rho_L, & M_{1/2} \geq 0 \\ \rho_R, & M_{1/2} < 0 \end{cases}$$

显然，接下来的问题就是如何定义网格界面处的声速 $a_{1/2}$ 以及 Mach 数 $M_{1/2}$ 。定义声速 $a_{1/2}$ 的方式有非常多的可能，特殊的定义形式也可能带来一些额外的特性。

[1]该特征值与非线性流场有关，通过它迎风切换能够在 $M = \pm 1$ 的声速条件处自动切换。

对于以往的 AUSM 类型格式，为了能够通过流动速度来缩放数值耗散，常常引入数值声速的概念，它可以借助一个缩放函数 f_a 表达为

$$\tilde{a}_{1/2} = f_a(\overline{M}; M_o) a_{1/2}$$

缩放因子 f_a 有多种形式，比如一种通过当地预处理方程组推导得到的形式为

$$f_a(\overline{M}; M_o) = \frac{\left[(1 - M_o^2)^2 \overline{M}^2 + 4M_o^2\right]^{1/2}}{1 + M_o^2}$$

其中参考 Mach 数、平均当地 Mach 数和截断 Mach 数分别为

$$\begin{aligned} M_o^2 &= \min\left(1, \max(\overline{M}^2, M_{co}^2)\right) \\ \overline{M}^2 &= \frac{1}{2}(M_L^2 + M_R^2) \\ M_{co} &= \kappa M_\infty, \quad \kappa = O(1) \end{aligned}$$

截断参数 M_{co} 名义上确定为 $O(M_\infty)$ 并且应当避免为零，否则会导致出现浮点数溢出错误。对于没有明显的特征 Mach 数的问题，比如激波管问题，就必须引入其他特征参数。

实际上，没有必要将缩放因子表达为那么复杂的形式，只需要保留其主要特征即可，因此这里给出一个更简单的形式：

$$f_a(M_o) = M_o(2 - M_o) \geq 0$$

利用数值声速 $\tilde{a}_{1/2}$ ，界面左右的数值 Mach 数也可以相应地定义出来：

$$\tilde{M}_{L/R} = \frac{u_{L/R}}{\tilde{a}_{1/2}} = \frac{M_{L/R}}{f_a}$$

它们将作为 Mach 数的分裂函数中的主要变量，而压强部分将在后面给出。为了作为区分，我们将这种类型的格式称为 AUSM+a 格式，因为 $\tilde{a}_{1/2}$ 在其中起核心作用。

但是，AUSM+up 格式希望将求解过程变得更简单、格式更具有鲁棒性，同时提升计算精度，最主要的目标是消除 f_a 趋于零时的奇异性。因此，AUSM+up 格式抛弃了 $\tilde{a}$ 的使用，而转为直接使用界面处的声速定义

$$M_{L/R} = \frac{u_{L/R}}{a_{1/2}}$$

作为该格式中的主要变量。我们现在可以利用 M_L 和 M_R 设置界面处的 Mach 数为

$$M_{1/2} = \mathscr{M}_{(m)}^+(M_L) + \mathscr{M}_{(m)}^-(M_R) + M_p$$

分裂 Mach 数 $\mathscr{M}_{(m)}^\pm$ 是 m 阶多项式函数，表达形式为

$$\begin{aligned} &\mathscr{M}_{(1)}^\pm(M) = \frac{1}{2}(M \pm |M|), \quad \mathscr{M}_{(2)}^\pm(M) = \pm\frac{1}{4}(M \pm 1)^2 \\ &\mathscr{M}_{(4)}^\pm(M) = \begin{cases} \mathscr{M}_{(1)}^\pm, & |M| \geq 1 \\ \mathscr{M}_{(2)}^\pm(1 \mp 16\beta \mathscr{M}_{(2)}^\mp), & |M| < 1 \end{cases} \end{aligned}$$

压强耗散项 M_p 用于提高低 Mach 数流动或多相流流动情况的计算精度，其定义为

$$M_p = -K_p \max(1 - \sigma\overline{M}^2, 0) \frac{p_R - p_L}{\rho_{1/2} a_{1/2}^2}$$

其中 $0 \leq K_p \leq 1$ ，$\sigma \leq 1$ 以及 $\rho_{1/2} = \frac{1}{2}(\rho_L + \rho_R)$ 。因子 $\max(1 - \sigma\overline{M}^2, 0) \geq 0$ 用于代替一个类似的以前的格式提出的低 Mach 数因子函数 $\Delta\mathscr{M}$ ：

$$\Delta\mathscr{M} = \left[\mathscr{M}_{(4)}^+ - \mathscr{M}_{(1)}^+\right](M_L) - \left[\mathscr{M}_{(4)}^- - \mathscr{M}_1^-\right](M_R) \geq 0$$

两个函数在数值上有着相似的表现，只是当前函数的形式要更简洁，因此采用当前函数作为控制因子函数。因子 $\max(1 - \sigma\overline{M}^2, 0)$ 只在 $M^2 \leq 1/\sigma$ 的区域起作用。

1.3.2 压强通量

在所有的 AUSM 类型格式中，界面压强通量的表达式一般为

$$p_{1/2} = \mathscr{P}^{+}_{(n)}(M_L)p_L + \mathscr{P}^{-}_{(n)}(M_R)p_R$$

其中 $n = 1, 3$ 或 5 表示多项式 $\mathscr{P}^{\pm}$ 的阶数。一般使用 5 阶多项式来得到更精确的解。它们也可以用分裂 Mach 数函数来进行表达：

$$\mathscr{P}^{\pm}_{(5)}(M) = \begin{cases} \frac{1}{M}\mathscr{M}^{\pm}_{(1)}, & |M| \geq 1 \\ \mathscr{M}^{\pm}_{(2)}\left[(\pm 2 - M) \mp 16\alpha M \mathscr{M}^{\mp}_{(2)}\right], & |M| < 1 \end{cases}$$

1.3.3 算法实现总结

首先定义

$$M_{L/R} = \frac{u_{L/R}}{a_{1/2}}$$

其中 $a_{1/2}$ 可以用 a_L 和 a_R 的简单平均得到，也可以使用下面的定义：

$$a_{1/2} = \min(\hat{a}_L, \hat{a}_R), \quad a^{*2} = \frac{2(\gamma - 1)}{\gamma + 1} H_t$$

$$\hat{a}_L = \frac{a^{*2}}{\max(a^*, u_L)}, \quad \hat{a}_R = \frac{a^{*2}}{\max(a^*, -u_R)}$$

对于多维流动，取 $u = \vec{U} \cdot \vec{n}$ ，其中 $\vec{n}$ 表示网格界面的单位法向量。界面处的 Mach 数的计算方式则为

$$\overline{M}^2 = \frac{u_L^2 + u_R^2}{2a_{1/2}^2}, \quad M_o^2 = \min\left(1, \max(\overline{M}^2, M_\infty^2)\right) \in [0, 1], \quad f_a(M_o) = M_o(2 - M_o) \in [0, 1]$$

$$M_{1/2} = \mathscr{M}^{+}_{(4)}(M_L) + \mathscr{M}^{-}_{(4)}(M_R) - \frac{K_p}{f_a}\max(1 - \sigma\overline{M}^2, 0)\frac{p_R - p_L}{\rho_{1/2}a_{1/2}^2}$$

其中 $0 \leq K_p \leq 1$ ，$\sigma \leq 1$ 以及 $\rho_{1/2} = \frac{1}{2}(\rho_L + \rho_R)$ 。

然后，质量通量定义为

$$\dot{m}_{1/2} = \begin{cases} a_{1/2}M_{1/2}\rho_L, & M_{1/2} \geq 0 \\ a_{1/2}M_{1/2}\rho_R, & M_{1/2} < 0 \end{cases}$$

压强通量则定义为

$$p_{1/2} = \mathscr{P}^{+}_{(5)}(M_L)p_L + \mathscr{P}^{-}_{(5)}(M_R)\rho_R - K_u\mathscr{P}^{+}_{(5)}\mathscr{P}^{-}_{(5)}(\rho_L + \rho_R)(f_a a_{1/2})(u_R - u_L)$$

其中 $0 \leq K_u \leq 1$ ， 以及

$$\alpha = \frac{3}{16}(-4 + 5f_a^2) \in [-\frac{3}{4}, \frac{3}{16}], \quad \beta = \frac{1}{8}$$

最后，整个通量表示为

$$\vec{f}_{1/2} = \begin{cases} \dot{m}_{1/2}\vec{\psi}_L + \vec{p}_{1/2}, & \dot{m}_{1/2} \geq 0 \\ \dot{m}_{1/2}\vec{\psi}_R + \vec{p}_{1/2}, & \dot{m}_{1/2} < 0 \end{cases}$$

需要注意，只有在压强通量中使用了数值声速，它通过因子 f_a 进行缩放，其余地方都没有使用数值声速。这个格式将速度项和压强项放入了 AUSM+ 格式中，并且基础格式只是其 $f_a = 1$ 的特殊形式。

1.4 SLAU 格式

参考文献Parameter-Free Simple Low-Dissipation AUSM-Family Scheme for All Speeds。

1.4.1 压强通量的修正

AUSM 类型格式的无粘数值通量一般都可以用下面的形式表述：

$$\vec{F}=\frac{\dot{m}+|\dot{m}|}{2}\vec{\psi}_L+\frac{\dot{m}-|\dot{m}|}{2}\vec{\psi}_R+\vec{p}$$

同时，大部分 AUSM 类型格式都是用下面的压强项：

$$p_{1/2}=\mathscr{P}_L^+p_L+\mathscr{P}_R^-p_R$$

其中

$$\mathscr{P}_{L/R}^{\pm}=\begin{cases}\frac{1}{4}(2\mp M_{L/R})(M_{L/R}\pm 1)^2\pm\alpha M_{L/R}(M_{L/R}^2-1)^2, & |M_{L/R}|<1\\ \frac{1}{2}\big(1+\mathrm{sign}(\pm M_{L/R})\big), & |M_{L/R}|\geq 1\end{cases}$$

并且 $M_{L/R}=(\vec{U}_{L/R}\cdot\vec{n})/\bar{c}$ 。我们取 $\alpha=0$ ，即忽略了 Liou 引入的高阶项。

上面的压强项也可以改写成如下的形式：

$$p_{1/2}=\frac{p_L+p_R}{2}+\frac{\mathscr{P}_L^+-\mathscr{P}_R^-}{2}(p_L-p_R)+(\mathscr{P}_L^++\mathscr{P}_R^--1)\frac{p_L+p_R}{2}$$

上式中的第三项，在低 Mach 数极限下忽略 Mach 数的高阶项同时引入合适的平均声速，可以得到另一种表示：

$$(\mathscr{P}_L^++\mathscr{P}_R^--1)\frac{p_L+p_R}{2}\quad\Rightarrow\quad\frac{3}{4\gamma}\frac{\rho_L+\rho_R}{2}\bar{c}(U_{n,L}-U_{n,R})$$

我们可以看到这一项作为数值耗散起作用，并有着声速来控制其大小。因此，它对于较高的亚声速速度是合适的，但是在低马赫数流动下声速比当地速度的阶数要高，将引入过大的数值耗散。[2]另一方面，数值试验证明简单地压强平均将会导致严重的震荡甚至发散，即使在低马赫数流动下也是如此。因此，压强项的耗散效应对于稳定性至关重要。

为了控制耗散的大小同时保持稳定性，我们对压强项的第三项作了替换，改为使用如下的压强项形式：

$$p_{1/2}=\frac{p_L+p_R}{2}+\frac{\mathscr{P}_L^+-\mathscr{P}_R^-}{2}(p_L-p_R)+f_p(\mathscr{P}_L^++\mathscr{P}_R^--1)\frac{p_L+p_R}{2}$$

其中 f_p 是一个无量纲函数，用来控制数值耗散的大小。对于第三项，为了在低 Mach 数区域具有对流速度的大小，而在高 Mach 数下能保持原有的形式，f_p 应当满足下面的特性：

$$\begin{cases}f_p\propto|M|, & |M|\ll 1\\ f_p=1, & |M|\geq 1\end{cases}$$

作为一个简单和光滑的函数，可以将其取为下面的形式：

$$f_p=1-\chi,\quad \chi=(1-\tilde{M})^2,\quad \tilde{M}=\min\left(1.0,\frac{1}{\bar{c}}\sqrt{\frac{|\vec{U}_L|^2+|\vec{U}_R|^2}{2}}\right)$$

该函数对局部马赫数具有渐近性。值得注意的是，其采用多维速度的模大小，而不是采用速度沿界面法向的分量大小，并且不需要提供参考值。同时，进行这样的对第三项的修正并不会破坏 AUSM 类型格式所拥有的接触不连续性保持 (contact discontinuity-preserving) 的性质，而且当前的修正只会在低 Mach 数的区域其作用，对于其他区域则恢复为原来的格式。因此，我们将会在格式中使用该压强项。

1.4.2 质量通量的选择与修正

AUSM 类型格式可以选择许多类型的函数作为质量通量函数，其中用于当地线化 Euler 方程的 Courant-Isaacson-Rees 格式质量通量（也即著名的 Roe 格式）将会在下面使用。主要出于以下几个原因：

1. 它完全是对于当地线化 Euler 方程的迎风格式；
2. 其中的每一项都具有明确的含义与作用；
3. 在使用该质量通量的时候，配合合适的斜率限制器能够抑制 overshoot 现象。

[2]如果我们将平均声速取为 $\bar{c}=\sqrt{\gamma\frac{p_L+p_R}{\rho_L+\rho_R}}$ ，那么上式这一转换是准确地。而取简单的 $\bar{c}=\frac{c_L+c_R}{2}$ 也能够使上式近似正确，因此为了简便将使用该简单的算数平均声速。

质量通量函数表示如下：

$$\dot{m}=\frac{1}{2}(\rho_L U_{n,L}+\rho_R U_{n,R})-\frac{1}{2}|\overline{U}_n|\Delta\rho-\frac{|\overline{M}+1|-|\overline{M}-1|}{4}\overline{\rho}\Delta U_n-\frac{|\overline{M}+1|+|\overline{M}-1|-2|\overline{M}|}{4\overline{c}}\Delta p$$

其中 $\Delta q=q_R-q_L$ 而 $\overline{q}$ 则表示两侧的算术平均（没有采用 Roe 平均）。上式的每一项都可以如下解释：

- 第一项表示两侧状态的平均；
- 第二项称为密度差项，表示的是直接扩散项；
- 第三项称为速度差项；
- 第四项称为压强差项，或者简称压强项，表示的是声阻尼 (acoustic damping)，因为该项可以在等熵条件下改写为[3]

$$\frac{|\overline{M}+1|+|\overline{M}-1|-2|\overline{M}|}{4\overline{c}}\Delta p\approx\frac{|\overline{M}+1|+|\overline{M}-1|-2|\overline{M}|}{4}\overline{c}\Delta\rho$$

使用该质量通量的格式称为简单高分辨率迎风格式 (SHUS)，或者称为 AUSM+R 格式，而它的使用了前面所述的压强项的低耗散版本则称为 low-dissipation SHUS。尽管这些格式要比 Roe 格式更加鲁棒，但是它们在二维管道的激波传播问题中仍然会遭遇 carbuncle 现象。根据 Liou 的研究，包含了压强差项的质量通量有着发生 carbuncle 现象的趋势，因此这个缺陷似乎需要通过检查压强差项来进行修正。但是根据数值试验，这样的修正并不能解决问题，因为修正后的通量在一维问题中表现出激波前的 overshoot 现象。这是由于质量通量中密度差项和速度差项提供的耗散效果相互抵消了，因为在激波处流动被压缩 ($\Delta\rho>0$) 且减速 ($\Delta U_n<0$)。换句话说，原始的质量通量表达在激波的法向方向上能够给出合适的耗散，但是在切线方向上则并不能。修正的质量通量 (没有压强差项) 的形式则仅适用于抑制切线方向上的激波不稳定性，而在一维问题中则会震荡。因此，添加在激波法向和切向的耗散需要分别考虑，以让全局稳定格式中的切向分量的耗散性比法向分量的耗散性更弱。

平均项和密度差项的组合能够得到一个非常简单的格式：

$$\dot{m}=\frac{1}{2}\Big(\rho_L U_{n,L}+\rho_R U_{n,R}-|\overline{U}_n|\Delta\rho\Big),\quad |\overline{U}_n|=\frac{\rho_L|U_{n,L}|+\rho_R|U_{n,R}|}{\rho_L+\rho_R}$$

需要注意，这里的速度平均采用的是密度加权平均，而没有采用简单的算数平均，这是因为如果直接采用算数平均会导致一些亚音速入流条件给出错误的质量通量方向。显然，比上式更加简单且对称的质量通量就是中心差分格式，但众所周知它不能很好地处理间断问题。因此，上式似乎是 AUSM 类型格式的最简单质量通量函数。数值试验表明，该简单格式在处理亚音速以上速度的情形工作得很好，但是该格式本身并不会进一步讨论，我们将在其中引入一个额外项。[4]

上面给的简单质量通量在许多流动条件下都是可以接受的，比如绕翼跨音速流。但是，在极端条件下，比如具有不对称强膨胀的流动，则需要引入下面的修正，否则会导致界面上的负内能：

$$\dot{m}=\frac{1}{2}\Big(\rho_L U_{n,L}+\rho_R U_{n,R}-|\overline{U}_n|\Delta\rho\Big)f_\rho$$

为了在超声速膨胀流动的情形下给出合适的质量通量，我们要求在无膨胀的情形下 $f_\rho\approx 1$ ，而在超声速强膨胀的情形下 $f_\rho=0$ 。下面这个简单地连续函数能够满足这样的要求：

$$f_\rho=1-g,\quad g=g_L\cdot g_R\in[0,1],\quad g_L=-\max\Big(\min(M_L,0),-1\Big),\quad g_R=\min\Big(\max(M_R,0),1\Big)$$

其中 $M_{L/R}$ 是前面定义的沿网格界面法向的 Mach 数。函数 $g=g_Lg_R$ 在强膨胀 ($M_L<-1$ 且 $M_R>1$) 时起作用，此时 $f_\rho=0$ ，也就不会给出非物理的通量。因此，在 SLAU 中消除膨胀情形中的非物理通量的方法与准确黎曼通量中的方式有所不同。需要强调的是，g 只在需要的时候起作用，其他情况下该通量将恢复到简单情形的物理。换句话说，g 本身就是尽可能地设计得形式简单，能够消除强膨胀中的非物理解，同时避免与原始通量形式的偏差。

下面我们再次考虑压强差项。尽管上面的质量通量能够在高超声速流动中给出满意的结果，但是在低 Mach 数情形中则会产生数值震荡。这意味着压强差项在稳定低速流动计算中有着重要作用。因此，我们考虑恢复压强差项，但是只让其在低 Mach 数区域起作用。在 Roe 格式质量通量的表达式中的压强差项被设计为只在亚音

[3]此时有 $\Delta p\approx\overline{c}\Delta\rho$ 。

[4]该函数能够给出正确的质量通量，即在静止间断情形，以及两侧压强和法向速度都是常数的移动接触间断的情形，都得到零通量结果。

速流动中起作用。但是数值试验表明，该项即使在高速流动中也会对激波法向方向产生作用。这种有利的效应在数值捕捉的激波结构的亚音速部分起作用；另一方面，该项在与激波平行的方向上以不希望的方式表现，其中数值扰动在激波内部被传播放大。因此，对于高速流动计算，压强差项产生的耗散应当在平行于激波的方向得到削弱。基于这些考虑，只在非常低 Mach 数起作用、并在激波处部分起作用的压强差项，以如下方式引入到质量通量中：

$$\dot{m} = \frac{1}{2}\Big(\rho_L U_{n,L} + \rho_R U_{n,R} - |\overline{U}_n|\Delta\rho\Big) f_\rho - \frac{\chi}{2\bar{c}}\Delta p$$

该格式能够平滑地从低速模式切换到高速模式，其简单性通过使用相同的函数 χ 得到了保持。使用该质量通量函数的格式称为 SLAU。SLAU 中的压强项与 Roe 格式中的压强项的主要差别在于横流方向上的行为。Roe 格式压强项只在高 Mach 数的流动方向上消失，而 SLAU 格式的压强项被设计为在高 Mach 数流动的所有方向上消失。

1.4.3 算法实现总结

SLAU 格式的算法过程总结如下：界面通量的计算表达式为

$$\vec{F}_{1/2} = \frac{\dot{m}+|\dot{m}|}{2}\vec{\psi}_L + \frac{\dot{m}-|\dot{m}|}{2}\vec{\psi}_R + p_{1/2}\vec{N}$$

其中 $\vec{\psi} = (1,u,v,w,H)^T$ ，$\vec{N} = (0,n_x,n_y,n_z,0)^T$ 。然后，压强通量为

$$p_{1/2} = \frac{p_L+p_R}{2} + \frac{\mathscr{P}_L^+ - \mathscr{P}_R^-}{2}(p_L-p_R) + (1-\chi)(\mathscr{P}_L^+ + \mathscr{P}_R^- - 1)\frac{p_L+p_R}{2}$$

$$\chi = (1-\tilde{M})^2, \quad \tilde{M} = \min\left(1.0, \frac{1}{c_{1/2}}\sqrt{\frac{u_L^2+v_L^2+w_L^2+u_R^2+v_R^2+w_R^2}{2}}\right)$$

$$\mathscr{P}_{L/R}^{\pm} = \begin{cases} \frac{1}{2}\big(1\pm\mathrm{sign}(M_{L/R})\big), & |M_{L/R}|\geq 1 \\ \frac{1}{4}(M_{L/R}\pm 1)^2(2\mp M_{L/R}), & |M_{L/R}|<1 \end{cases}, \quad M = \frac{U_n}{c_{1/2}} = \frac{un_x+vn_y+wn_z}{c_{1/2}}, \quad c_{1/2} = \frac{c_L+c_R}{2}$$

质量通量则为

$$\dot{m} = \frac{1}{2}\left(\rho_L(U_{n,L}+|\overline{U}_n|^+) + \rho_R(U_{n,R}-|\overline{U}_n|^-) - \frac{\chi}{c_{1/2}}(p_R-p_L)\right)$$

$$|\overline{U}_n|^+ = (1-g)|\overline{U}_n| + g|U_{n,L}|, \quad |\overline{U}_n|^- = (1-g)|\overline{U}_n| + g|U_{n,R}|, \quad |\overline{U}_n| = \frac{\rho_L|U_{n,L}|+\rho_R|U_{n,R}|}{\rho_L+\rho_R}$$

$$g = -\max\Big(\min(M_L,0),-1\Big)\times\min\Big(\max(M_R,0),1\Big)\in[0,1]$$

1.4.4 SLAU2：SLAU 的改进版本

参考文献Towards shock-stable and accurate hypersonic heating computations: A new pressure flux for AUSM-family schemes。SLAU 是 AUSM 类型中的一种低耗散格式，并且没有任何需要调节的参数。SLAU 除了在亚音速和低速区域能够给出非常好的结果，但是与其他通量函数类似，在超声速流动中的某些情况下激波位置会出现异常现象。而网格界面的声速 $c_{1/2}$ 的定义，与数值激波的捕捉效果息息相关。因为 $c_{1/2}$ 通常是作为一个格式的参数，而其他物理量则一般通过网格中心的值插值得到。自然地，$c_{1/2}$ 有许多选择，比如算数平均或几何平均，下面也将讨论哪种形式的表达能够提升 SLAU 在捕捉激波时的稳定性。由于激波中的 $c_{1/2}$ 完全是一个数值结果，没有物理或数学解释，因此数值试验是唯一找到其合适值的方法。

大量的一维和多维数值试验表明，SLAU 在采用 AUSM+ 格式所使用的 $c_{1/2}$ 形式时能够改善激波的稳定性，即使用

$$c_{1/2} = \min(\tilde{c}_L,\tilde{c}_R), \quad \tilde{c}_L = \frac{c^{*2}}{\max(c^*,U_{n,L})}, \quad \tilde{c}_R = \frac{c^{*2}}{\max(c^*,-U_{n,R})}, \quad c^{*2} = \frac{2(\gamma-1)}{\gamma+1}H$$

经过这一修正后，SLAU 的界面声速大小得到减小，而这也导致数值耗散项将提供更多耗散。因此，这也说明原始的 SLAU 的耗散并不足以稳定多维的异常，而当前的修正能够提供更加合适的耗散。基于这些发现，下面也

将进一步改进 SLAU 格式。

为了方便阐述，我们将 SLAU 的压强通量改写为如下形式：

$$p_{1/2}=\frac{p_L+p_R}{2}+\frac{\mathscr{P}_L^+-\mathscr{P}_R^-}{2}(p_L-p_R)+\left(1-(1-\tilde{M})^2\right)(\mathscr{P}_L^++\mathscr{P}_R^--1)\frac{p_L+p_R}{2}$$

$$\tilde{M}=\min\left(1.0,\frac{1}{c_{1/2}}\sqrt{\frac{u_L^2+v_L^2+w_L^2+u_R^2+v_R^2+w_R^2}{2}}\right)$$

根据这一方程，在超声速情况下上式中的第三项（耗散项）的调整系数变为 1 。换句话说，在超声速情况下这一项引入的数值耗散是常数，与 Mach 数无关。前面已经指出原始的形式的数值耗散是不足的，并且这一缺陷在更大 Mach 数强激波问题中更为显著。因此，我们建议将这一项修正为如下形式来让耗散与 Mach 数成比例：

$$p_{1/2}=\frac{p_L+p_R}{2}+\frac{\mathscr{P}_L^+-\mathscr{P}_R^-}{2}(p_L-p_R)+\frac{1}{c_{1/2}}\sqrt{\frac{u_L^2+v_L^2+w_L^2+u_R^2+v_R^2+w_R^2}{2}}(\mathscr{P}_L^++\mathscr{P}_R^--1)\frac{p_L+p_R}{2}$$

考虑拓展到真实流体的可能，上式被进一步改进为[5]

$$p_{1/2}=\frac{p_L+p_R}{2}+\frac{\mathscr{P}_L^+-\mathscr{P}_R^-}{2}(p_L-p_R)+\sqrt{\frac{u_L^2+v_L^2+w_L^2+u_R^2+v_R^2+w_R^2}{2}}(\mathscr{P}_L^++\mathscr{P}_R^--1)\bar{\rho}c_{1/2}$$

使用这一新的压强通量的 SLAU 就被称为 SLAU2 格式。

1.4.5 HR-SLAU2 格式

参考文献Reduced dissipation AUSM-family fluxes: HR-SLAU2 and HR-AUSM+up for high resolution unsteady flow simulations。首先回顾一下 HR-Roe 格式，其非粘性数值通量 $\vec{F}_{\text{HR-Roe}}$ 可以写成

$$\vec{F}_{\text{HR-Roe}}=\frac{1}{2}(\vec{F}_L+\vec{F}_R)-\frac{\gamma_{\text{HR}}}{2}|\hat{\mathbf{A}}|\cdot(\vec{W}_R-\vec{W}_L)$$

其中 $\vec{F}_{L/R}$ 和 $\vec{W}_{L/R}$ 分别表示左右两侧的通量和守恒变量。上式右侧的第一项为中心差分项，而第二项为耗散项。这里的 γ_{HR} 取值 $[0,1]$ ，分别将格式转换为中心差分格式和原始 Roe 格式。但是实际上，直接令 $\gamma_{\text{HR}}=0$ 会导致不稳定的解，因此 Winkler 将其定义为

$$\gamma_{\text{HR}}=\max\left(\gamma_{\min},\gamma_2,\gamma_w\right)$$

其中 $\gamma_{\min}$ 是人为设置的最低下限，后面将会讨论。而 γ_2 则为

$$\gamma_2=\begin{cases}1, & \phi_{face}\geq 120^\circ\\ 1-f_d\cdot\left[\frac{2}{3}\cos(\phi_{face})+\frac{1}{3}\right], & 0^\circ\leq\phi_{face}<120^\circ\end{cases}$$

其中 ϕ_{face} 是向量 $(\vec{r}_{ij}-\vec{r}_i)$ 与 $(\vec{r}_j-\vec{r}_{ij})$ 的夹角，$\vec{r}_{ij},\vec{r}_i$ 与 $\vec{r}_j$ 分别表示网格界面 ij 的中心、网格 i 的体心、网格 j 的体心。如果这三个点在一条直线上，那么 ϕ_{face} 就为零，于是 γ_2 也就变成零（如果 $f_d=1$ ）。当 ϕ_{face} 大于 120 度，格式将恢复到原始的 Roe 通量。注意 f_d 是 DDES 参数，但是在这里我们将其设置为 1 。γ_2 称为 wiggle detector，当下面的关系满足时它等于 1 ：

$$\left[(\nabla\phi)_{ij}^L\cdot\vec{n}_{ij}\right]\cdot\left[(\nabla\phi)_c\cdot\vec{n}_{ij}\right]<0,\quad\left[(\nabla\phi)_{ij}^R\cdot\vec{n}_{ij}\right]\cdot\left[(\nabla\phi)_c\cdot\vec{n}_{ij}\right]<0$$

其中 $\phi=(\rho,u,v,w,p)$ ，且 $(\nabla\phi)_c\cdot\vec{n}_{ij}=\frac{\phi_j-\phi_i}{|\vec{r}_j-\vec{r}_i|}$ 。在这里，我们简单地令 $\phi=p$ 。

对于一维网格或笛卡尔网格，上述方程可以简化为

$$\phi_1:=(\phi_i-\phi_{i-1})\cdot(\phi_{i+1}-\phi_i)<0,\quad\phi_2:=(\phi_{i+2}-\phi_{i+1})\cdot(\phi_{i+1}-\phi_i)<0$$

换句话说，γ_w 定义为

$$\gamma_w=\frac{1-\text{sign}\left(\min(\phi_1,\phi_2)\right)}{2}$$

然而该表达式在 $\phi_1=0$ 或 $\phi_2=0$ 处不连续，因此一些更光滑的表达式，比如

$$\gamma_2=\frac{1-\tanh\left(5\pi\min(\phi_1,\phi_2)\right)}{2}$$

[5] 当然，如果要拓展到其他真实流体，就不能使用 AUSM+ 的基于理想气体的界面声速，而只能使用简单算数平均界面声速。

能够更好地收敛。

总之，只有在计算网格核流动变量都光滑的情况下，γ_{HR} 才会取比 1 小的值，也就得到了耗散削减型的 Roe 格式 (reduced-dissipation form of Roe, HR-Roe)，否则原始的 Roe 通量将被使用。处于稳定性的原因，该耗散削减只用于动量方程（网格法向分量部分）。

基于以上内容，类似的耗散削减方法可以用于其他格式。比如 SLAU 格式的压强通量为

$$(\tilde{p})_{\text{SLAU}} = \frac{p_L + p_R}{2} + \frac{\mathscr{P}_L^+ - \mathscr{P}_R^-}{2}(p_L - p_R) + (1-\chi)\left(\mathscr{P}_L^+ + \mathscr{P}_R^- - 1\right)\frac{p_L + p_R}{2}$$

其中第一项为中心差分项，第二项和第三项是耗散项。在低速流情况下，第二项正比于 $O(M^2)$ （非常小），而第三项正比于 $O(M)$ ，因此在 HR-SLAU 中，第三项将被修改：

$$(\tilde{p})_{\text{HR-SLAU}} = \frac{p_L + p_R}{2} + \frac{\mathscr{P}_L^+ - \mathscr{P}_R^-}{2}(p_L - p_R) + \gamma_{\text{HR}} \cdot (1-\chi)\left(\mathscr{P}_L^+ + \mathscr{P}_R^- - 1\right)\frac{p_L + p_R}{2}$$

其中 γ_{HR} 的定义与 HR-Roe 格式中的定义相同。由于压强通量只在动量守恒方程中出现，因此只有动量方程中的耗散被控制。

另外，SLAU2 所采用的压强通量为

$$(\tilde{p})_{\text{SLAU2}} = \frac{p_L + p_R}{2} + \frac{\mathscr{P}_L^+ - \mathscr{P}_R^-}{2}(p_L - p_R) + \sqrt{\frac{|\vec{U}_L|^2 + |\vec{U}_R|^2}{2}} \cdot \left(\mathscr{P}_L^+ + \mathscr{P}_R^- - 1\right)\bar{\rho}\bar{c}$$

相同的操作也可以用在上式中得到 HR-SLAU2 格式：

$$(\tilde{p})_{\text{HR-SLAU2}} = \frac{p_L + p_R}{2} + \frac{\mathscr{P}_L^+ - \mathscr{P}_R^-}{2}(p_L - p_R) + \gamma_{\text{HR}} \cdot \sqrt{\frac{|\vec{U}_L|^2 + |\vec{U}_R|^2}{2}} \cdot \left(\mathscr{P}_L^+ + \mathscr{P}_R^- - 1\right)\bar{\rho}\bar{c}$$

在超声速流动的情况下，HR-SLAU2 的耗散要比 HR-SLAU 的耗散要大，然而在低亚音速流的情况下，HR-SLAU2 的耗散要比 HR-SLAU 要小。

1.5 HLL-CPS 格式

参考A low diffusion flux-split scheme for all Mach number flows。在 HLL-CPS 格式中，无粘通量在离散前按照 Zha-Bilgen 构造或者 AUSM 构造的方式分裂为了对流部分和压强部分。通量的对流部分使用简单的迎风格式进行计算，而压强通量则将包含了密度跳跃的 HLL 方法替换为相应的压强跳跃。在网格 i 及其相邻网格 j 的界面的无粘 HLL-CPS 通量如下：

$$\mathbf{F} = M_{nK}\begin{bmatrix}\rho \\ \rho u_n \\ \rho u_t \\ \rho E\end{bmatrix}_K a_K + \frac{1}{2}\begin{bmatrix}0 \\ p_L + p_R \\ 0 \\ (pu_n)_L + (pu_n)_R\end{bmatrix} + \frac{S_R + S_L}{2(S_R - S_L)}\begin{bmatrix}0 \\ p_L - p_R \\ 0 \\ (pu_n)_L - (pu_n)_R\end{bmatrix} - \frac{S_R S_L}{\bar{a}^2(S_R - S_L)}\begin{bmatrix}p_L - p_R \\ (pu_n)_L - (pu_n) \\ (pu_t)_L - (pu_t) \\ \frac{\bar{a}^2}{\gamma-1}(p_L - p_R) + \frac{1}{2}\left((pq^2)\right.\end{bmatrix}$$

其中 u_n 和 u_t 分别是法向和切向速度，$q^2 = u_n^2 + u_t^2$ 是绝对速度，S_R 和 S_L 分别是右侧和左侧的最大移动波速。这里

$$M_{nK} = \begin{cases}\frac{\bar{u}_n}{\bar{u}_n - S_L}, & \text{if } \bar{u}_n \geq 0.0 \\ \frac{\bar{u}_n}{\bar{u}_n - S_R}, & \text{if } \bar{u}_n < 0.0\end{cases}, \quad a_K = \begin{cases}u_{nL} - S_L, & \text{if } \bar{u}_n \geq 0.0 \\ u_{nL} - S_R, & \text{if } \bar{u}_n < 0.0\end{cases}, \quad K = \begin{cases}L & \text{if } \bar{u}_n \geq 0.0 \\ R & \text{if } \bar{u}_n < 0.0\end{cases}$$

其中 $\bar{u}_n = \frac{1}{2}(u_{nL} + u_{nR})$ 是网格界面的平均速度。波速定义为

$$S_L = \min(0, u_{nL} - a_L, \tilde{u}_n - \tilde{a}), \quad S_R = \max(0, u_{nR} + a_R, \tilde{u}_n + \tilde{a})$$

其中 $\tilde{u}_n$ 和 $\tilde{a}$ 是界面上的 Roe 平均法向速度和声速。

通过非对称分析可以发现，上述的 HLL-CPS 格式会允许 $p(x,t) = P_0(t) + M_* p_1(x,t)$ 类型的压强扰动，因此，HLL-CPS 格式无法解析低 Mach 数的流动特征，因为压强扰动与连续的 Euler 方程并不一致。可以发现在低 Mach 数下法向速度跳跃是当前 HLL-CPS 格式出现非物理行为的原因。除此之外，通过 Reynolds 数分析可以发现 HLL-CPS 格式无法像 Roe,HLLC 和 HLLEM 格式那样精确地解析剪切层。

为了改进 HLL-CPS 在低 Mach 数流动以及剪切流中的行为，将采用下面的修正：使用 Thornber 等人提出的

重构法向速度和切向速度的方法，有

$$u_{nL}^* = \frac{u_{nL}+u_{nR}}{2} + z\frac{u_{nL}-u_{nR}}{2}, \quad u_{tL}^* = \frac{u_{tL}+u_{tR}}{2} + z\frac{u_{tL}-u_{tR}}{2}$$
$$u_{nR}^* = \frac{u_{nL}+u_{nR}}{2} + z\frac{u_{nR}-u_{nL}}{2}, \quad u_{tR}^* = \frac{u_{tL}+u_{tR}}{2} + z\frac{u_{tR}-u_{tL}}{2}$$

其中上标 $*$ 表示重构速度。Mach 数函数 z 定义为

$$z = \min\Big(\max\big(\frac{q_L}{a_L}, \frac{q_R}{a_R}\big), 1\Big)$$

波速也将通过重构速度来进行更新，现在其定义为

$$S_L^* = \min(0, u_{nL}^* - a_L, \tilde{u}_n^* - \tilde{a}), \quad S_R^* = \max(0, u_{nR}^* + a_R, \tilde{u}_n^* + \tilde{a})$$

其中 $\tilde{u}_n^*$ 是重构的 Roe 平均面法向速度。HLL-CPS 对流和压强通量将使用上述速度和波速进行计算。

1.6 KFVS 方法

当 Boltzmann 方程中的碰撞项为零时，也即使用零阶 Chapman-Enskog 展开时可以得到 Euler 解。也即 KFVS 从下述方程进行构造：

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u\frac{\partial f}{\partial x} + v\frac{\partial f}{\partial y} + w\frac{\partial f}{\partial z} = 0$$

对于可压缩理想气体模型下的 Euler 方程，可以使用 Maxwell 平衡态分布函数：

$$g = \rho\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{\frac{3+K}{2}} e^{-\lambda\big((u-U)^2+(v-V)^2+(w-W)^2+\xi^2\big)}$$

其中 $\lambda = \frac{1}{2RT} = \frac{\rho}{2p}$。只要在网格界面上重构出平衡态分布函数的形式，然后就可以通过求矩就可以计算出通量：

$$F_\rho = |\vec{S}| \iiint_{-\infty}^{+\infty}\int_0^{+\infty} u g_L \mathrm{d}u\mathrm{d}v\mathrm{d}w\mathrm{d}\xi + |\vec{S}| \iiint_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{0} u g_R \mathrm{d}u\mathrm{d}v\mathrm{d}w\mathrm{d}\xi$$
$$F_{\rho U} = |\vec{S}| \iiint_{-\infty}^{+\infty}\int_0^{+\infty} u^2 g_L \mathrm{d}u\mathrm{d}v\mathrm{d}w\mathrm{d}\xi + |\vec{S}| \iiint_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{0} u^2 g_R \mathrm{d}u\mathrm{d}v\mathrm{d}w\mathrm{d}\xi$$
$$F_{\rho V} = |\vec{S}| \iiint_{-\infty}^{+\infty}\int_0^{+\infty} uv g_L \mathrm{d}u\mathrm{d}v\mathrm{d}w\mathrm{d}\xi + |\vec{S}| \iiint_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{0} uv g_R \mathrm{d}u\mathrm{d}v\mathrm{d}w\mathrm{d}\xi$$
$$F_{\rho W} = |\vec{S}| \iiint_{-\infty}^{+\infty}\int_0^{+\infty} uw g_L \mathrm{d}u\mathrm{d}v\mathrm{d}w\mathrm{d}\xi + |\vec{S}| \iiint_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{0} uw g_R \mathrm{d}u\mathrm{d}v\mathrm{d}w\mathrm{d}\xi$$
$$F_{\rho E} = |\vec{S}| \iiint_{-\infty}^{+\infty}\int_0^{+\infty} \frac{1}{2}(u^3+uv^2+uw^2+u\xi^2) g_L \mathrm{d}u\mathrm{d}v\mathrm{d}w\mathrm{d}\xi + |\vec{S}| \iiint_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{0} \frac{1}{2}(u^3+uv^2+uw^2+u\xi^2) g_R \mathrm{d}u\mathrm{d}v\mathrm{d}w\mathrm{d}\xi$$

需要注意这里的分子速度是在网格界面的局部坐标下进行描述的，其中 u 指向界面法向，v, w 则指向界面切向，可以使用当地坐标系进行转换。

引入下面的记号：

$$\langle u^k\rangle = \frac{1}{\rho}\int_{-\infty}^{+\infty} u^k g\,\mathrm{d}u, \quad \langle u^k\rangle^+ = \frac{1}{\rho}\int_0^{+\infty} u^k g\,\mathrm{d}u, \quad \langle u^k\rangle^- = \frac{1}{\rho}\int_{-\infty}^{0} u^k g\,\mathrm{d}u$$

那么各通量可以改写为

$$\begin{aligned}
F_\rho &= \rho_L\langle u\rangle_L^+|\vec{S}| + \rho_R\langle u\rangle_R^-|\vec{S}| \\
F_{\rho U} &= \rho_L\langle u^2\rangle_L^+|\vec{S}| + \rho_R\langle u^2\rangle_R^-|\vec{S}| \\
F_{\rho V} &= \rho_L\langle u\rangle_L^+\langle v\rangle_L|\vec{S}| + \rho_R\langle u\rangle_R^-\langle v\rangle_R|\vec{S}| \\
F_{\rho W} &= \rho_L\langle u\rangle_L^+\langle w\rangle_L|\vec{S}| + \rho_R\langle u\rangle_R^-\langle w\rangle_R|\vec{S}| \\
F_{\rho E} &= \frac{1}{2}|\vec{S}|\rho_L\Big(\langle u^3\rangle_L^+ + \langle u\rangle_L^+\langle v^2\rangle_L + \langle u\rangle_L^+\langle w^2\rangle_L + \langle u\rangle_L^+\langle \xi^2\rangle_L\Big) \\
&\quad + \frac{1}{2}|\vec{S}|\rho_R\Big(\langle u^3\rangle_R^- + \langle u\rangle_R^-\langle v^2\rangle_R + \langle u\rangle_R^-\langle w^2\rangle_R + \langle u\rangle_R^-\langle \xi^2\rangle_R\Big)
\end{aligned}$$

第 2 章 TVD 格式

数值方法很重要的一个性质就是收敛性。对于非线性系统，其收敛性被证明依赖于非线性稳定性 (nonlinear stability)，这涉及到泛函分析理论的一些概念，比如紧致性 (compactness)。具有总变差有界的函数集合被限定在了紧致集合。总变差稳定方法 (Total Variation Stable methods) 于是被定义为那些在紧致函数集合中进行基于网格的估计的方法。可以证明总变差稳定方法是收敛的。总变差稳定方法的一个子集是那些总变差不会随时间增大的方法，它们被称为总变差减小方法 (Total Variation Diminishing methods)。

2.1 总变差 (The Total Variation)

给定一个函数 $u = u(x)$ ，其总变差定义为

$$TV(u) = \lim_{\delta\to 0}\sup \frac{1}{\delta}\int_{-\infty}^{+\infty} \left|u(x+\delta) - u(x)\right| \mathrm{d}x$$

如果 $u(x)$ 是光滑的，上式等价于[1]

$$TV(u) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left|u'(x)\right| \mathrm{d}x$$

如果 $u = u(x,t)$ ，可以对上面的两个定义进行拓展，但是对于收敛性来说，我们只需要定义 $u(x,t)$ 在固定时间 $t = t^n$ 的总变差就足够了，并且，如果 $u^n = \{u_i^n\}$ 是一个网格函数，那么 u^n 的总变差就定义为

$$TV(u^n) = \sum_i \left|u_{i+1}^n - u_i^n\right|$$

显然，要让 $TV(u^n)$ 是有界的，就必须假设在 $i \to \pm\infty$ 时 $u_i^n = 0$ 或者 $u_i^n = \text{const}$ 。

对于非线性标量守恒律

$$\frac{\partial}{\partial t}u + \frac{\partial}{\partial x}f(u) = 0 \tag{2.1}$$

当初始值 $u(x,0)$ 有着有界的总变差的时候，其初值问题的精确解有着一个基本的特性：

- 不会有关于 x 的新的极值点产生；
- 一个当地最小值的大小将会增加 (它不会减小)，并且一个当地最大值的大小将会减小 (它不会增加)。

根据这个特性，总变分 $TV(u(t))$ 是一个关于时间的递减函数 (非递增函数)，即

$$TV(u(t_2)) \le TV(u(t_1)) \quad \forall t_2 \ge t_1$$

精确解的这一特性将会在设计的数值方法中被模仿。

2.2 单调格式

一类用于求解非线性标量守恒律 (2.1) 的方式是单调格式 (Monotone Schemes)，其定义如下：

定义 2.1 (单调格式)

一个格式

$$u_i^{n+1} = H(u_{i-k_L+1}^n, \cdots, u_{i+k_R}^n)$$

其中 k_L 和 k_R 是两个非负整数，被称为是单调的，如果有

$$\frac{\partial H}{\partial u_j^n} \ge 0, \quad \forall j$$

也即 H 是关于其任一个参数的非递减函数。 ♣

---

[1]实际上，即使对于不连续的 $u(x)$ ，在广义函数论的角度来说这依然是正确的。

上述定义实际上等价于

$$\text{if } v_i^n \geq u_i^n \ \ \forall i \ \ \text{then } v_i^{n+1} \geq u_i^{n+1}$$

这个特性也是守恒律 (2.1) 的精确解的离散版本：如果方程 (2.1) 的两个初始值函数 $v_0(x)$ 和 $u_0(x)$ 满足 $v_0(x) \geq u_0(x)\ \forall x$ ，那么它们相应的解 $v(x,t)$ 和 $u(x,t)$ 满足 $v(x,t) \geq u(x,t),\ t > 0$ 。因此单调格式 (monotone schemes) 模仿了守恒律 (2.1) 的一个基本特性。

当单调格式应用到非线性守恒律 (2.1) 后，会有一个有用的性质：给定数据集 $\{u_i^n\}$ ，如果解集 $\{u_i^{n+1}\}$ 是通过单调格式得到的，那么

$$\max_i\{u_i^{n+1}\} \leq \max_i\{u_i^n\}, \quad \min_i\{u_i^{n+1}\} \geq \min_i\{u_i^n\}$$

上述特点的一个显然的结果就是

$$\max_i\{u^n\} \leq \max_i\{u_i^{n-1}\} \leq \cdots \leq \max_i\{u_i^0\}$$
$$\min_i\{u^n\} \geq \min_i\{u_i^{n-1}\} \geq \cdots \geq \min_i\{u_i^0\}$$

这一结果表明没有新的极值点产生，因此数值震荡 (spurious oscillations) 将不会出现。在使用单调格式进行计算时，随着时间推移最小值会增大、最大值会减小，这会导致极值的削减 (clipping of extrema)，也是单调格式的一个缺陷。

数值实验表明，使用线性二阶精度格式来求解线性对流方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} f(u) = 0, \quad f(u) = au \tag{2.2}$$

在具有光滑解的问题中要比一阶格式优异得多。但是，当解存在大梯度时，比如在间断附近，这些方法会产生数值震荡，而单调格式能够避免大梯度附近的假震荡现象。单调格式的缺点，主要在于它们有限的精度。Godunov's theorem 从理论上证明了，对于线性格式，精度要求和单调性要求是两个相互冲突的要求，即不存在单调的、线性格式用于求解线性对流方程 (2.2) 能够达到二阶或更高精度。在大梯度附近的区域，不同方法会产生不同形式的假震荡，比如 Lax-Wendroff 格式会在波后产生假震荡，而 Warming-Beam 格式会在波前产生假震荡。这与方法中的局部截断误差中的主导项的形式有关。

最早尝试提供一种合理的方法来规避 Godunov's theorem 的是 Roe，其核心思想是构建自适应算法，使其能够根据当地解的特性进行自我调整。显然，即使应用于线性偏微分方程，在变系数非线性格式中也是如此，系数必须是关于数据的函数。下面给出用于线性方程的算法的一些特定数据类型：

定义 2.2 (数据兼容算法)

一个格式被称为是关于给定数据集 $\{u_i^n\}$ 兼容的 (compatible)，如果由算法给出的在每个点 i 的解 u_i^{n+1} 是限制在迎风对 (u_{i-s}^n, u_i^n) 的，其中 $s \equiv \text{sign}(c) = \text{sign}(a)$ 。对于一个给定的点 i ，当 $c > 0$ 时的迎风对是 (u_{i-1}^n, u_i^n) ；当 $c < 0$ 时的迎风对是 (u_i^n, u_{i+1}^n) 。♣

我们可以将上述定义重新表述为：如果 u_i^{n+1} 落在 u_{i-s}^n 和 u_i^n 之间，则称一个格式是数据兼容的。一个算法的数据兼容性要求可以方便地表述为

$$\min\{u_{i-s}^n, u_i^n\} \leq u_i^{n+1} \leq \max\{u_{i-s}^n, u_i^n\}$$

该条件也等价于要求

$$0 \leq \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{u_{i-s}^n - u_i^n} \leq 1 \tag{2.3}$$

现在我们考虑用于线性对流方程 (2.2) 的任意三点格式：

$$u_i^{n+1} = b_{-1} u_{i-1}^n + b_0 u_i^n + b_1 u_{i+1}^n$$

可以将其改写为增量的形式：

$$u_i^{n+1} = u_i^n - b_{-1} \Delta u_{i-\frac{1}{2}} + b_1 \Delta u_{i+\frac{1}{2}}$$

其中 $\Delta u_{i-\frac{1}{2}} = u_i^n - u_{i-1}^n$ ，$\Delta u_{i+\frac{1}{2}} = u_{i+1}^n - u_i^n$ 。很容易证明任意三点格式的数据兼容性条件为

$$0 \le b_{-1} - b_1/r_i \le 1, \quad \text{if } c > 0$$
$$0 \le b_1 - b_{-1}r_i \le 1, \quad \text{if } c < 0$$

其中

$$r_i = \frac{\Delta u_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta u_{i+\frac{1}{2}}}$$

2.3 TVD 和单调性保持格式

考虑一个具有如下形式的数值格式

$$u_i^{n+1} = H(u_{i-k_L+1}^n, \cdots, u_{i+k_R}^n) \tag{2.4}$$

其中 k_L 和 k_R 是两个非负整数，来求解标量守恒律 (2.1)。于是我们有如下的定义：

定义 2.3 (TVD 格式)

如果

$$TV(u^{n+1}) \le TV(u^n), \quad \forall n$$

那么格式 (2.4) 被称为一个总变差减小格式。显然可以进一步得到

$$TV(u^n) \le TV(u^{n-1}) \le \cdots \le TV(u^0)$$

其中 $\{u_i^0\}$ 是 $t=0$ 时刻的数据。

♣

定义 2.4 (单调性保持格式)

如果无论何时 $\{u_i^n\}$ 为单调，解集 $\{u_i^{n+1}\}$ 也在同样的意义上单调，也即，如果 $\{u_i^n\}$ 单调递增则 $\{u_i^{n+1}\}$ 也单调递增；如果 $\{u_i^n\}$ 单调递减则 $\{u_i^{n+1}\}$ 也单调递减，那么具有形式 (2.4) 的用于非线性标量守恒律 (2.1) 的格式被称为单调性保持格式 (Monotonicity Preserving Schemes)。

♣

对于非线性标量守恒律，有定理证明，单调格式 (monotone schemes) 的集合 S_{mon} 包含在 TVD 格式的集合 S_{tvd} 中，而 TVD 格式又包含在单调性保持格式的集合 S_{mpr} 中，也即

$$S_{\text{mon}} \subset S_{\text{tvd}} \subset S_{\text{mpr}}$$

Harten 考虑了一类非线性格式：

$$u_i^{n+1} = u_i^n - C_{i-\frac{1}{2}}\Delta u_{i-\frac{1}{2}} + D_{i+\frac{1}{2}}\Delta u_{i+\frac{1}{2}}$$

其中 $\Delta u_{i+\frac{1}{2}} = u_{i+1}^n - u_i^n$ 并且系数 $C_{i-\frac{1}{2}}, D_{i+\frac{1}{2}}$ 一般也是这些数据的函数。Harten 证明了对于具有上述形式的求解 (2.1) 的格式，该格式为 TVD 的充分条件是系数满足

$$C_{i+\frac{1}{2}} \ge 0, \quad D_{i+\frac{1}{2}} \ge 0, \quad 0 \le C_{i+\frac{1}{2}} + D_{i+\frac{1}{2}} \le 1$$

Harten's theorem 提供了一个构造高分辨率格式的有用工具。

2.4 通量限制器

下面我们将构建一个 TVD 版本的基本 WAF 格式来求解线性对流方程 (2.2)。首先引入一个新的参数 ϕ 并将 WAF 通量改写为

$$f_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(1+\phi)(au_i^n)$$

选择不同的 ϕ 会产生不同的格式：当 $\phi = |c|$ 时为 Lax-Wendroff 格式，当 $\phi = s \equiv \text{sign}(a) = \text{sign}(c)$ 时为 Godunov 一阶迎风格式，当 $\phi = -s$ 时为顺风格式 (无条件不稳定)。

我们需要找到 ϕ 合适的取值范围，让其作为数据依赖的变量来构建出 WAF 格式的 TVD 版本。根据上述的极限情况 $\phi = s$ 和 $\phi = -s$ 我们限制 ϕ 要满足如下条件

$$-1 \le \phi \le 1$$

ϕ 的上界和下界的其他选择当然也是可能的。通过引入网格界面处的 ϕ 的合适表达，相应的网格界面通量变成

$$f_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(1+\phi_{i+\frac{1}{2}})(au_i^n) + \frac{1}{2}(1-\phi_{i+\frac{1}{2}})(au_{i+1}^n)$$
$$f_{i-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(1+\phi_{i-\frac{1}{2}})(au_{i-1}^n) + \frac{1}{2}(1-\phi_{i-\frac{1}{2}})(au_i^n)$$

因此，对于每个网格界面 $i+\frac{1}{2}$ 我们要寻找一个 $\phi_{i+\frac{1}{2}}$ 来产生一个修正的 WAF 通量来得到一个 TVD 格式。

首先我们假设线性对流方程 (2.2) 中的 $a > 0$ ，将上述通量表达式代入并进行简单的代数改写可以得到

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{u_{i-1}^n - u_i^n} = \frac{1}{2}c\Big[\frac{1}{r_{i+\frac{1}{2}}}(1-\phi_{i+\frac{1}{2}}) + \phi_{i-\frac{1}{2}} + 1\Big]$$

其中

$$r_{i+\frac{1}{2}} = \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{u_{i+1}^n - u_i^n}$$

将数据兼容性条件 (2.3) 代入可以得到

$$-1 \le \frac{1}{r_{i+\frac{1}{2}}}(1-\phi_{i+\frac{1}{2}}) + \phi_{i-\frac{1}{2}} \le \frac{2-c}{c}$$

而对于负速度 a 的 (2.2)，此时 CFL 数 $c < 0$ ，可以用同样的方式推导得到一样的结果，只是 c 要换为绝对值并且 $r_{i+\frac{1}{2}}$ 此时定义为

$$r_{i+\frac{1}{2}} = \frac{u_{i+2}^n - u_{i+1}^n}{u_{i+1}^n - u_i^n}$$

因此，对于 (2.2) 正的和负的波速度都可以统一表达为

$$-1 \le \frac{1}{r_{i+\frac{1}{2}}}(1-\phi_{i+\frac{1}{2}}) + \phi_{i-\frac{1}{2}} \le \frac{2-|c|}{|c|} \tag{2.5}$$

其中

$$r_{i+\frac{1}{2}} = \begin{cases} \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{u_{i+1}^n - u_i^n}, & a > 0 \\ \frac{u_{i+2}^n - u_{i+1}^n}{u_{i+1}^n - u_i^n}, & a < 0 \end{cases}$$

因此 $r_{i+\frac{1}{2}}$ 总是迎风变化量 $\Delta u_{i-\frac{1}{2}} \equiv u_i^n - u_{i-1}^n$, $a > 0$ 或 $\Delta u_{i+\frac{3}{2}} \equiv u_{i+2}^n - u_{i+1}^n$, $a < 0$ 与当地变化量 $\Delta u_{i+\frac{1}{2}} = u_{i+1}^n - u_i^n$ ，也即

$$r_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\Delta_{\text{upwind}}}{\Delta_{\text{local}}}$$

比值 $r_{i+\frac{1}{2}}$ 现在被认为是一个流动参数，能够用来构建函数 ϕ 来适应当地的数据条件。于是我们定义[2]

$$\phi_{i+\frac{1}{2}} = \phi_{i+\frac{1}{2}}(r_{i+\frac{1}{2}}, |c|)$$

现在我们要找到 $\phi_{i+\frac{1}{2}}$ 的一个合适的数值范围，为此我们选择了两个不等式，一个限制 $\phi_{i+\frac{1}{2}}$ 而另一个限制 $\phi_{i-\frac{1}{2}}$ ，以此来让不等式 (2.5) 自动地满足。我们令

$$-1 - L \le \frac{1}{r_{i+\frac{1}{2}}}(1-\phi_{i+\frac{1}{2}}) \le \frac{2(1-|c|)}{|c|}$$

$$L \le \phi_{i-\frac{1}{2}} \le 1$$

其中下界 $L \in [-1, |c|]$ ，这能提供一定的自由度来选择有多少顺风性质能够被允许。对于 $L = -1$ ，所有的顺风性质都能够被允许；对于 $L = 0$ 则禁止所有的顺风特性。

[2] 一般来说，我们都会忽略掉参数 $|c|$ 。

对于 $r>0$ 和 $r<0$ 都有一个 TVD 区域，对下界 L 的选择决定了左 TVD 区域，对于 $L=-1$ 该区域变成一条线 $\phi_R(r,|c|)=1$ (Godunov 一阶迎风)。限制器函数 $\phi(r,|c|)$ 的任何固定值都会导致在格式中引入一个数值粘性 α_ϕ 。对于 $|c|\le\phi(r,|c|)\le 1$ 这个数值粘性是正的并且会抹平极值和间断；对于 $L\le\phi(r,|c|)\le|c|$ 这个数值粘性是负的并且会让间断更陡峭。显然 $\phi(r,|c|)=|c|$ 不会引入额外的数值粘性且对应于 Lax-Wendroff 格式。在 TVD 区域内构建的限制器函数 $\phi=\phi(r,|c|)$ 都能产生一个无震荡格式，唯一的限制是

$$\phi(1,|c|)=|c|$$

这保证了在 r 接近于 1 的时候能够有二阶精度，此时迎风变化量与当地变化量是相当的 (解的光滑区域)。

一个比较成熟的构建高阶 TVD 格式的方法就是通量限制器方法 (flux limiter approach)，它要求一个精度大于等于二阶的通量 $f^{\text{HI}}_{i+\frac{1}{2}}$ 以及一个单调的、低阶 (一阶) 通量 $f^{\text{LO}}_{i+\frac{1}{2}}$ 。我们通过线性对流方程 (2.2) 来进行具体说明。进行格式离散后有

$$u_i^{n+1}=u_i^n+\frac{\Delta t}{\Delta x}(f_{i-\frac{1}{2}}-f_{i+\frac{1}{2}})$$

于是定义高阶 TVD 通量为

$$f^{\text{TVD}}_{i+\frac{1}{2}}=f^{\text{LO}}_{i+\frac{1}{2}}+\phi_{i+\frac{1}{2}}(f^{\text{HI}}_{i+\frac{1}{2}}-f^{\text{LO}}_{i+\frac{1}{2}})$$

2.5 非结构网格限制器

参考New Unstructured-Grid Limiter Functions。

对于 Godunov 类型的格式，如果使用线性重构来得到二阶精度，则界面 ij 左右侧的状态分别由下面的方式计算：

$$u_L=u_i+\frac{1}{2}\phi_i\nabla u_i\cdot(\vec{x}_j-\vec{x}_i),\quad u_R=u_j-\frac{1}{2}\phi_j\nabla u_j\cdot(\vec{x}_j-\vec{x}_i)$$

其中梯度 ∇u_i 和 ∇u_j 通过线性最小二乘法计算，ϕ_i,ϕ_j 分别是节点 i 和 j 的限制器函数。基于边界的离散可以通过更高阶的通量和重构方法来拓展到更高阶精度，对于这些格式可以用下面的形式来应用限制器：

$$u_L=u_i+\phi_i(u_L^{\text{HO}}-u_i),\quad u_R=u_j+\phi_j(u_R^{\text{HO}}-u_j)$$

其中 u_L^{HO} 和 u_R^{HO} 是在界面处重构出来的高阶解。

Barth 和 Jesperson 提出了一种用于非结构网格的限制器：

$$\phi_i^{\text{BJ}}=\min_{j\in N(i)}\begin{cases}\phi^{\text{BJ}}(\frac{u_{\max}-u_i}{u_{ij}-u_i}), & u_{ij}>u_i\\ \phi^{\text{BJ}}(\frac{u_{\min}-u_i}{u_{ij}-u_i}), & u_{ij}<u_i\\ 1, \quad u_{ij}=u_i\end{cases}$$

其中 $N(i)$ 是 i 的面相邻单元的集合。u_{ij} 是在没有限制器的情况下在界面重构出来的值，比如使用线性重构则为

$$u_{ij}=u_i+\nabla u_i\cdot(\vec{x}_{ij}-\vec{x}_i)$$

$u_{\min}$ 和 $u_{\max}$ 是当地相邻单元集合 $N(i)\cup i$ 中的最小和最大值。函数 ϕ^{BJ} 定义为

$$\phi^{\text{BJ}}(y)=\min(1,y),\quad y=\frac{u_{\max}-u_i}{u_{ij}-u_i}\ \text{or}\ \frac{u_{\min}-u_i}{u_{ij}-u_i}$$

可以看到，函数 $\phi^{\text{BJ}}(y)$ 会在 $u_{ij}<u_{\min}$ 时将 u_{ij} 拉向 $u_{\min}$ ，在 $u_{ij}>u_{\max}$ 时将 u_{ij} 拉向 $u_{\max}$ ，从而将重构的解限制在区间 $[u_{\min},u_{\max}]$ ，这一有界的重构进而导致下一个时间步或平衡态的有界解。

关于 y 的值有如下的一些特点：

- 根据定义，始终有 $y\ge 0$ ，因为在 $u_{ij}<u_i$ 时有 $u_{\min}-u_i\le 0$ 以及 $u_{ij}-u_i<0$ ，此时 $y=(u_{\min}-u_i)/(u_{ij}-u_i)$ 不会是负数；在 $u_{ij}>u_i$ 时有 $u_{\max}-u_i\ge 0$ 以及 $u_{ij}-u_i>0$ ，此时 $y=(u_{\max}-u_i)/(u_{ij}-u_i)$ 也不会是负数。也就是说，限制器函数并不会依赖于 $u_{ij}-u_i$ 、$u_{\min}-u_i$ 和 $u_{\max}-u_i$ 的符号。
- 在极值处，比如 $u_i=u_{\min}$ 或 $u_i=u_{\max}$ 处有 $y=0$ 。
- 当相邻值为 $u_{\min}$ 或 $u_{\max}$ 并且采用线性重构时则会有 $y=2$ ，因此此时 $u_{ij}-u_i$ 恰好就是 $u_{\min\,/\,\max}-u_i$ 的一半。

在 $y=2$ 处，Barth-Jesperson 限制器给出 $\phi^{\mathrm{BJ}}(2)=1$ ，因此它保持了线性重构解而能够保持至少二阶精度。需要注意更高阶的重构会导致 u_{ij} 落在 $y=2$ 附近的区域来得到光滑解，而 Barth-Jesperson 限制器在 $y\geq 1$ 的时候都有 $\phi^{\mathrm{BJ}}=1$ ，预期能够保持更高阶的精度。

Venkatakrishnan 指出 Barth-Jesperson 限制器由于使用了 minimum 函数而是不可微分的，这会阻碍非线性求解器的迭代收敛性。为了解决这一问题，Venkatakrishnan 提出了一个光滑可微分的限制器：

$$\phi^{\mathrm{VK}}(y)=\frac{y^2+2y}{y^2+y+2}$$

这个函数对所有 y 都是可微分的，这有利于缓解收敛问题，同时它也满足 $\phi^{\mathrm{VK}}=1$ ，因此能够在光滑区域保持二阶精度。通过分析 $\phi^{\mathrm{VK}}(2+h)$ 关于 h 的展开可以分析出其有着 $O(h)$ 的偏移，这对于二阶精度来说是足够的，因为它只会在梯度中引入 $O(h)$ 的误差。

Venkatakrishnan 指出，上述非结构网格限制器的形式为导致其对机器零值的噪声非常敏感，并导致非线性求解器在几乎为常数的区域出错，比如空气动力学问题中的来流区域。为了解决问题，Venkatakrishnan 提出采用如下的修正来减少在光滑区域的限制，首先引入

$$y=\frac{\Delta_+}{\Delta_-},\quad \Delta_-=u_{ij}-u_i,\quad \Delta_+=\begin{cases} u_{\max}-u_i, & u_{ij}\geq u_i\\ u_{\min}-u_i, & u_{ij}<u_i\end{cases}$$

Venkatakrishnan 所提出的修正表达为

$$\phi_\varepsilon^{\mathrm{VK}}(\frac{\Delta_+}{\Delta_-})=\frac{1}{\tilde{\Delta}_-}\cdot\frac{(\Delta_+^2+\varepsilon^2)\tilde{\Delta}_-+2\tilde{\Delta}_-^2\Delta_+}{\Delta_+^2+2\tilde{\Delta}_-^2+\Delta_+\tilde{\Delta}_-+\varepsilon^2}$$

其中 K 是一个参数，Δx 表示网格宽度，$\varepsilon^2=(K\Delta x)^3$ ，$\tilde{\Delta}_-=\mathrm{sign}(\Delta_-)(|\Delta_-|+10^{-12})$ 。值得注意的是，上述修正在 Δ_- 恰等于零的时候会失效。另一种更简单的修正限制器的方式可以表述为

$$\phi_\varepsilon^{\mathrm{VK}}(\frac{\Delta_+}{\Delta_-})=\frac{\Delta_+^2+2\Delta{-}\Delta_++\varepsilon^2}{\Delta_+^2+2\Delta_-^2+\Delta_+\Delta_-+\varepsilon^2}$$

2.6 WBAP 限制器

Choi 和 Liu 提出了一个称为 biased averaging procedure (BAP) 的限制器方法，见The Reconstruction of Upwind Fluxes for Conservation Laws: Its Behavior in Dynamic and Steady State Calculations。BAP 有许多很好的特点：非常简单、高效、无参数、可微分且能够在非结构网格中使用。但是，该限制器尚未得到广泛运用，因为其需要配合通量分裂方法进行使用，而如果采用 MUSCL 类型的有限体积格式则有可能出现在间断处不足以控制振荡的情况。为了改进 BAP，提出了一个 weighted biased averaging procedure (WBAP)，见The multi-dimensional limiters for solving hyperbolic conservation laws on unstructured grids。在 WBAP 和 BAP 之间有着一些主要的差异，在 WBAP 中，引入了一个自由参数 ε 来构建新的 biased function，该参数可以用来控制 biased function 的耗散特性；除此之外，WBAP 在 biased averaging procedure 中添加了非线性权重函数来增强其捕捉强激波的鲁棒性；而且，WBAP 被用在流动变量的梯度上，使得它保持了自相似性并像 MUSCL 方法的斜率限制器那样工作。

对于一维的有限体积格式，WBAP 可以写成

$$\sigma^L=\sigma^R=L(\bar{\sigma}_i,\bar{\sigma}_{i+1},\bar{\sigma}_{i-1})$$

其中 $\bar{\sigma}_i$ 是网格体心的梯度，而函数 L 具有如下的形式：

$$L(a_0,a_1,a_2,\cdots,a_j)=a_0\cdot W\Big(1,\frac{a_1}{a_0},\frac{a_2}{a_0},\cdots,\frac{a_j}{a_0}\Big)$$

其中 a_0 是 L 的第一个参数。函数 W 称为 WBAP 限制器，它与 TVD-MUSCL 格式的限制器工作方式类似，定义为

$$W(\theta_0,\theta_1,\theta_2,\cdots,\theta_J)=B^{-1}\Big[\sum_{j=0}^{J}\omega_j B(\theta_j)\Big]$$

其中 $\theta_j = a_j/a_0$ ，而 B 是 biased function 且 ω_j 是相应的权重。我们采用如下的 biased function 和权重函数：

$$B(x) = \frac{x}{\sqrt{\varepsilon^2 + x^2}}, \quad B^{-1}(x) = \frac{\varepsilon x}{\sqrt{1 - x^2}}$$

$$\omega_j = \frac{\alpha_j}{\sum_{j=0}^{J} \alpha_j}, \quad \alpha_j = \frac{\lambda_j}{B(\theta_j)^2 + \delta}$$

其中 ε 是一个自由参数，$\delta = 10^{-10}$ 是一个小量用于避免除以零的情况，而 λ_j 则为

$$\lambda_j = \begin{cases} n, & \text{if } j = 0 \\ 1, & \text{else} \end{cases}$$

如果 $n = 1$ ，那么权重系数就完全由光滑显示器来确定。如果 $n \geq 1$ ，则中心网格的贡献会被强调。

第 3 章 WENO 格式

参考高精度 WENO 格式的发展与展望。加权本质无振荡 (Weighted Essentially Non-Oscillatory, WENO) 格式是在本质无振荡 (Essentially Non-Oscillatory, ENO) 格式基础上发展而来的，是求解双曲守恒律方程和对流占优问题的一类重要的高精度数值格式。ENO 格式通过选择多个候选模板并利用差商计算候选模板上定义的代数多项式的光滑程度来选取重构多项式，这样的设计使得 ENO 格式具有模板自动选择且格式鲁棒性好的特点，其在靠近激波处能有效保持本质无振荡的性质同时在解的光滑区域不存在精度退化的问题。不同于 ENO 格式只选择一个最光滑的候选模板，WENO 格式使用所有的候选模板组合来进行高精度空间数值离散。高精度 WENO 格式构造的关键因素是模板的选择和非线性权的构造。当所有候选模板上的多项式都充分光滑时非线性权应该与线性权接近，这样可以从重构多项式的组合中提供尽可能高的空间离散精度。当候选模板上的数值解存在强间断而其他模板上的数值解充分光滑时，间断区域的模板应该选择较小的非线性权以此来减少对应的重构多项式对数值计算结果的影响，从而抑制伪振荡的出现。

3.1 WENO-JS

下面以一维标量守恒律方程来说明五阶有限体积 WENO-JS 格式的构造。分片光滑函数 $u(x,t)$ 在网格 $\Omega_i = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ 上的单元平均值为

$$\overline{u}(x_i,t) = \frac{1}{|\Omega_i|}\int_{\Omega_i} u(x,t)\mathrm{d}x$$

为了在 Ω_i 上构造重构多项式，选取如下的三个子模板：

$$S_1 = \{\Omega_{i-2}, \Omega_{i-1}, \Omega_i\}, \quad S_2 = \{\Omega_{i-1}, \Omega_i, \Omega_{i+1}\}, \quad S_3 = \{\Omega_i, \Omega_{i+1}, \Omega_{i+2}\}$$

现在令 $p_1(x), p_2(x), p_3(x)$ 分别为三个模板上的重构二次多项式，这些多项式满足

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{|\Omega_{i-2}|}\int_{\Omega_{i-2}} p_1(x)\mathrm{d}x = \overline{u}_{i-2}, \quad \frac{1}{|\Omega_{i-1}|}\int_{\Omega_{i-1}} p_1(x)\mathrm{d}x = \overline{u}_{i-1}, \quad \frac{1}{|\Omega_i|}\int_{\Omega_i} p_1(x)\mathrm{d}x = \overline{u}_i \\
&\frac{1}{|\Omega_{i-1}|}\int_{\Omega_{i-1}} p_2(x)\mathrm{d}x = \overline{u}_{i-1}, \quad \frac{1}{|\Omega_i|}\int_{\Omega_i} p_2(x)\mathrm{d}x = \overline{u}_i, \quad \frac{1}{|\Omega_{i+1}|}\int_{\Omega_{i+1}} p_2(x)\mathrm{d}x = \overline{u}_{i+1} \\
&\frac{1}{|\Omega_i|}\int_{\Omega_i} p_3(x)\mathrm{d}x = \overline{u}_i, \quad \frac{1}{|\Omega_{i+1}|}\int_{\Omega_{i+1}} p_3(x)\mathrm{d}x = \overline{u}_{i+1}, \quad \frac{1}{|\Omega_{i+2}|}\int_{\Omega_{i+2}} p_3(x)\mathrm{d}x = \overline{u}_{i+2}
\end{aligned}$$

这些候选模板上多项式的任意凸组合理论上只有三阶精度，为了在解的光滑区获得更高的数值精度，选定包含所有候选模板中网格的大模板 $S = \{\Omega_{i-2}, \Omega_{i-1}, \Omega_i, \Omega_{i+1}, \Omega_{i+2}\}$，在大模板上构造四次重构多项式 $p(x)$，其满足条件

$$\frac{1}{|\Omega_{i-2}|}\int_{\Omega_{i-2}} p(x)\mathrm{d}x = \overline{u}_{i-2}, \quad \frac{1}{|\Omega_{i-1}|}\int_{\Omega_{i-1}} p(x)\mathrm{d}x = \overline{u}_{i-1}, \quad \frac{1}{|\Omega_i|}\int_{\Omega_i} p(x)\mathrm{d}x = \overline{u}_i, \quad \frac{1}{|\Omega_{i+1}|}\int_{\Omega_{i+1}} p(x)\mathrm{d}x = \overline{u}_{i+1}, \quad \frac{1}{|\Omega_{i+2}|}\int_{\Omega_{i+2}} p(x)\mathrm{d}$$

借助上述多项式，我们可以在 Ω_i 的边界处要求

$$p(x_{i+1/2}) = \sum_{k=1}^{3} \gamma_k p_k(x_{i+1/2})$$

来实现边界重构量达到五阶精度，其中 γ_k 称为线性权。因为线性权需要满足上面的关系式子，所以和计算网格的拓扑结构有关且不能取任意值。假设计算网格是等距分布的，通过计算可以得到这些多项式在 Ω_i 的边界处的一组线性权为

$$\gamma_1 = \frac{1}{10}, \quad \gamma_2 = \frac{3}{5}, \quad \gamma_3 = \frac{3}{10}$$

Jiang 和 Shu 使用如下定义的光滑指示器来表示重构多项式在目标单元 Ω_i 上的光滑程度:

$$
\begin{aligned}
\beta_1 &= |\Omega_i| \int_{\Omega_i} \left(\frac{\mathrm{d}p_1(x)}{\mathrm{d}x}\right)^2 + |\Omega_i|^3 \int_{\Omega_i} \left(\frac{\mathrm{d}^2p_1(x)}{\mathrm{d}x^2}\right)^2 \mathrm{d}x \\
\beta_2 &= |\Omega_i| \int_{\Omega_i} \left(\frac{\mathrm{d}p_2(x)}{\mathrm{d}x}\right)^2 + |\Omega_i|^3 \int_{\Omega_i} \left(\frac{\mathrm{d}^2p_2(x)}{\mathrm{d}x^2}\right)^2 \mathrm{d}x \\
\beta_3 &= |\Omega_i| \int_{\Omega_i} \left(\frac{\mathrm{d}p_3(x)}{\mathrm{d}x}\right)^2 + |\Omega_i|^3 \int_{\Omega_i} \left(\frac{\mathrm{d}^2p_3(x)}{\mathrm{d}x^2}\right)^2 \mathrm{d}x
\end{aligned}
$$

对于均匀网格，三个光滑指示器的计算结果为

$$
\begin{aligned}
\beta_1 &= \frac{13}{12}(\overline{u}_{i-2} - 2\overline{u}_{i-1} + \overline{u}_i)^2 + \frac{1}{4}(\overline{u}_{i-2} - 4\overline{u}_{i-1} + 3\overline{u}_i)^2 \\
\beta_2 &= \frac{13}{12}(\overline{u}_{i-1} - 2\overline{u}_i + \overline{u}_{i+1})^2 + \frac{1}{4}(\overline{u}_{i-1} - \overline{u}_{i+1})^2 \\
\beta_3 &= \frac{13}{12}(\overline{u}_i - 2\overline{u}_{i+1} + \overline{u}_{i+2})^2 + \frac{1}{4}(3\overline{u}_i - 4\overline{u}_{i+1} + \overline{u}_{i+2})^2
\end{aligned}
$$

为了使格式能在光滑区域达到五阶精度并在解的强间断区域不出现数值振荡，需要结合线性权和光滑指示器来设置非线性权：

$$
\omega_k = \frac{\tilde{\omega}_k}{\sum_{r=1}^{3} \tilde{\omega}_r}, \quad \tilde{\omega}_r = \frac{\gamma_r}{(\varepsilon + \beta_r)^2}
$$

这里 ε 是一个用于避免分母为零的很小的正数，一般取 10^{-6} 。按照这种方法构造的非线性权形成的重构多项式的凸组合可以在解的光滑区域达到五阶数值精度。这种做法也可以保证 WENO 格式的计算结果在解的强间断区域具有本质无振荡的性质。如果三个小模板上都不存在强间断，则三个重构多项式在目标单元上都是光滑的，它们的凸组合不论非线性权如何取也具有本质无振荡的性质。将线性权替换为非线性权即可得到重构值：

$$
u_{i+1/2}^- = \omega_1 p_1(x_{i+1/2}) + \omega_2 p_2(x_{i+1/2}) + \omega_2 p_2(x_{i+1/2})
$$

3.1.1 一维三阶 WENO-JS 格式

对于一维三阶 WENO-JS 格式，需要用到两个子模板 $S_1 = \{\Omega_{i-1}, \Omega_i\}$ 和 $S_2 = \{\Omega_i, \Omega_{i+1}\}$ 。为了方便叙述，现在考虑均匀网格下的情况，并记 $x_{i-1} = -h$ ，$x_i = 0$ ，$x_{i+1} = h$ ，那么分别在两个模板上构造的一次多项式 $p_1(x) = a_0 + a_1 x$ 和 $p_2(x) = b_0 + b_1 x$ 就满足

$$
\overline{u}_{i-1} = \frac{1}{h}\int_{-\frac{3}{2}h}^{-\frac{1}{2}h} a_0 + a_1 x \, \mathrm{d}x = a_0 - a_1 h, \quad \overline{u}_i = \frac{1}{h}\int_{-\frac{1}{2}h}^{\frac{1}{2}h} a_0 + a_1 x \, \mathrm{d}x = a_0
$$

$$
\overline{u}_i = \frac{1}{h}\int_{-\frac{1}{2}h}^{\frac{1}{2}h} b_0 + b_1 x \, \mathrm{d}x = b_0, \quad \overline{u}_{i+1} = \frac{1}{h}\int_{\frac{1}{2}h}^{\frac{3}{2}h} b_0 + b_1 x \, \mathrm{d}x = b_0 + b_1 h
$$

所以各系数可以表示为

$$
a_0 = \overline{u}_i, \quad a_1 = \frac{\overline{u}_i - \overline{u}_{i-1}}{h}, \quad b_0 = \overline{u}_i, \quad b_1 = \frac{\overline{u}_{i+1} - \overline{u}_i}{h}
$$

而在大模板 $S = \{\Omega_{i-1}, \Omega_i, \Omega_{i+1}\}$ 上则可以构造二次多项式 $p(x) = c_0 + c_1 x + c_2 x^2$ ，其满足

$$
\begin{aligned}
\overline{u}_{i-1} &= \frac{1}{h}\int_{-\frac{3}{2}h}^{-\frac{1}{2}h} c_0 + c_1 x + c_2 x^2 \, \mathrm{d}x = c_0 - c_1 h + c_2 h^2 \frac{13}{12} \\
\overline{u}_i &= \frac{1}{h}\int_{-\frac{1}{2}h}^{\frac{1}{2}h} c_0 + c_1 x + c_2 x^2 \, \mathrm{d}x = c_0 + c_2 h^2 \frac{1}{12} \\
\overline{u}_{i+1} &= \frac{1}{h}\int_{\frac{1}{2}h}^{\frac{3}{2}h} c_0 + c_1 x + c_2 x^2 \, \mathrm{d}x = c_0 + c_1 h + c_2 h^2 \frac{13}{12}
\end{aligned}
$$

于是可以得到

$$\begin{bmatrix}\overline{u}_{i-1}\\ \overline{u}_i\\ \overline{u}_{i+1}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & -h & \frac{13}{12}h^2\\ 1 & 0 & \frac{1}{12}h^2\\ 1 & h & \frac{13}{12}h^2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_0\\ c_1\\ c_2\end{bmatrix}\quad\Rightarrow\quad\begin{bmatrix}c_0\\ c_1\\ c_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-\frac{1}{24} & \frac{13}{12} & -\frac{1}{24}\\ -\frac{1}{2h} & 0 & \frac{1}{2h}\\ \frac{1}{2h^2} & -\frac{1}{h^2} & \frac{1}{2h^2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\overline{u}_{i-1}\\ \overline{u}_i\\ \overline{u}_{i+1}\end{bmatrix}$$

从而

$$p(\frac{1}{2}h)=-\frac{1}{6}\overline{u}_{i-1}+\frac{5}{6}\overline{u}_i+\frac{1}{3}\overline{u}_{i+1},\quad p_1(\frac{1}{2}h)=-\frac{1}{2}\overline{u}_{i-1}+\frac{3}{2}\overline{u}_i,\quad p_2(\frac{1}{2}h)=\frac{1}{2}\overline{u}_i+\frac{1}{2}\overline{u}_{i+1}$$

据此可以得到

$$p(\frac{1}{2}h)=\frac{1}{3}p_1(\frac{1}{2}h)+\frac{2}{3}p_2(\frac{1}{2}h)$$

也即确定出在界面 $x=\frac{1}{2}h$ 的两个线性权分别为 $\gamma_1=\frac{1}{3}$ 和 $\gamma_2=\frac{2}{3}$ 。同样的还有

$$p(-\frac{1}{2}h)=\frac{1}{3}\overline{u}_{i-1}+\frac{5}{6}\overline{u}_i-\frac{1}{6}\overline{u}_{i+1},\quad p_1(-\frac{1}{2}h)=\frac{1}{2}\overline{u}_{i-1}+\frac{1}{2}\overline{u}_i,\quad p_2(-\frac{1}{2}h)=\frac{3}{2}\overline{u}_i-\frac{1}{2}\overline{u}_{i+1}$$

据此可以得到

$$p(-\frac{1}{2}h)=\frac{2}{3}p_1(-\frac{1}{2}h)+\frac{1}{3}p_2(-\frac{1}{2}h)$$

也即确定出在界面 $x=-\frac{1}{2}h$ 的两个线性权分别为 $\gamma_1=\frac{2}{3}$ 和 $\gamma_2=\frac{1}{3}$ 。

在均匀网格的情况下，两个光滑指示器分别为

$$\beta_1=(\overline{u}_i-\overline{u}_{i-1})^2,\quad \beta_2=(\overline{u}_i-\overline{u}_{i+1})^2$$

而设置的非线性权则为

$$\omega_k=\frac{\tilde{\omega}_k}{\sum_{r=}^2\tilde{\omega}_r},\quad \tilde{\omega}_r=\frac{\gamma_r}{(\varepsilon+\beta_r)^2}$$

至此就能够重构出 Ω_i 的界面上的值：

$$u(\frac{1}{2}h)=\omega_1p_1(\frac{1}{2}h)+\omega_2p_2(\frac{1}{2}h),\quad u(-\frac{1}{2}h)=\omega_1p_1(-\frac{1}{2}h)+\omega_2p_2(-\frac{1}{2}h)$$

3.1.2 WENO-Z3 格式

WENO-JS 的非线性权的设置导致其会引入过多的耗散，并不能在极值点处达到预期的精度，WENO-Z3 格式则提出了新的非线性权来减少耗散，参考Improvement of third-order WENO-Z scheme at critical points。在 WENO-Z3 格式中，非线性权定义为

$$\omega_k=\frac{\alpha_k}{\sum_{r=1}^2\alpha_r},\quad \alpha_r=d_r\Big(1+\frac{\tau}{\beta_r+\varepsilon}\Big),\quad \tau=|\beta_1-\beta_2|,\quad \varepsilon=10^{-40}$$

参考Third-order WENO scheme with a new smoothness indicator。WENO-Z3 格式的非线性权依然有许多可以改进的空间，也因此衍生出许多格式。

WENO-N3 格式则采用了另一个光滑指示器：

$$\tau=\left|\frac{\beta_1+\beta_2}{2}-\beta_3\right|$$

其中

$$\beta_3=\frac{13}{12}(\overline{u}_{i-1}-2\overline{u}_i+\overline{u}_{i+1})^2+\frac{1}{4}(\overline{u}_{i-1}-\overline{u}_{i+1})^2$$

WENO-NP3 格式则进一步对光滑指示器进行修正：

$$\tau=\Big(\Big|\frac{\beta_1+\beta_2}{2}-\beta_3\Big|\Big)^p$$

为了达到理想精度，一般取 $p=\frac{3}{2}$ 。

WENO-F3 格式也提出了其对光滑指示器的一种修正：

$$\tau=\Big(\Big|\frac{\beta_1+\beta_2}{2}-\dot{\beta}_3\Big|\Big)^p$$

其中

$$\dot{\beta}_3 = \frac{1}{12}(\overline{u}_{i-1} - 2\overline{u}_i + \overline{u}_{i+1})^2 + \frac{1}{4}(\overline{u}_{i-1} - \overline{u}_{i+1})^2$$

而 p 一般可以取 $p = 1, \frac{3}{2}$ 。

3.2 WENO-ZQ

Zhu 和 Qiu 基于非等距模板方法发展了一类高精度 WENO-ZQ 格式 (或者称为 US-WENO 格式)。因为 WENO-ZQ 格式在空间高精度离散时线性权的限制较少，易于编程实现并且不受计算网格空间拓扑结构的约束，因此这种新型 WENO 格式适用于非结构网格、自适应网格和运动网格等。下面介绍一维五阶有限体积 WENO-ZQ 格式的构造过程。

首先选择大模板 $S_1 = \{\Omega_{i-2}, \Omega_{i-1}, \Omega_i, \Omega_{i+1}, \Omega_{i+2}\}$ 以及两个小模板 $S_2 = \{\Omega_{i-1}, \Omega_i\}$ ，$S_3 = \{\Omega_i, \Omega_{i+1}\}$ 。接着在大模板上构造四次多项式 $p_1(x)$ ，其满足条件

$$\frac{1}{|\Omega_{i-2}|}\int_{\Omega_{i-2}} p_1(x)\mathrm{d}x = \overline{u}_{i-2}, \quad \frac{1}{|\Omega_{i-1}|}\int_{\Omega_{i-1}} p_1(x)\mathrm{d}x = \overline{u}_{i-1}, \quad \frac{1}{|\Omega_{i}|}\int_{\Omega_{i}} p_1(x)\mathrm{d}x = \overline{u}_{i}, \quad \frac{1}{|\Omega_{i+1}|}\int_{\Omega_{i+1}} p_1(x)\mathrm{d}x = \overline{u}_{i+1}, \quad \frac{1}{|\Omega_{i+2}|}\int_{\Omega_{i+2}} p$$

同理可以在两个小模板 S_2, S_3 上分别构造线性多项式 $p_2(x)$ 和 $p_3(x)$ ，其满足条件

$$\frac{1}{|\Omega_{i-1}|}\int_{\Omega_{i-1}} p_2(x)\mathrm{d}x = \overline{u}_{i-1}, \quad \frac{1}{|\Omega_{i}|}\int_{\Omega_{i}} p_2(x)\mathrm{d}x = \overline{u}_{i}$$

$$\frac{1}{|\Omega_{i}|}\int_{\Omega_{i}} p_3(x)\mathrm{d}x = \overline{u}_{i}, \quad \frac{1}{|\Omega_{i+1}|}\int_{\Omega_{i+1}} p_3(x)\mathrm{d}x = \overline{u}_{i+1}$$

根据 CWENO 的构造思想，这里不需要通过组合约束来求得目标单元 Ω_i 边界点处的最优线性权，而是可以选择非零的任意线性权 $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ ，为了保证空间离散的数值稳定性可以要求这些线性权为正数并满足 $\gamma_1+\gamma_2+\gamma_3 = 1$ 。现在将 $p_1(x)$ 的形式改写成

$$p_1(x) = \gamma_1\left(\frac{1}{\gamma_1}p_1(x) - \frac{\gamma_2}{\gamma_1}p_2(x) - \frac{\gamma_3}{\gamma_1}p_3(x)\right) + \gamma_2 p_2(x) + \gamma_3 p_3(x)$$

利用

$$\beta_k = \sum_l h^{2l-1}\int_{\Omega_i}\left(\frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}x^l}p_k(x)\right)^2\mathrm{d}x$$

可以计算得到三个模板上的光滑指示器 $\beta_l, l = 1, 2, 3$ 。β_l 越小，则多项式 $p_l(x)$ 在目标网格 Ω_i 上越光滑。对于均匀网格的情况，它们的具体表达式为

$$\begin{aligned}
\beta_1 &= \frac{1}{144}(\overline{u}_{i-2} - 8\overline{u}_{i-1} + 8\overline{u}_{i+1} - \overline{u}_{i+2})^2 + \frac{1}{15600}(-11\overline{u}_{i-2} + 174\overline{u}_{i-1} - 326\overline{u}_i + 174\overline{u}_{i+1} - 11\overline{u}_{i+2})^2 \\
&\quad + \frac{781}{2880}(-\overline{u}_{i-2} + 2\overline{u}_{i-1} - 2\overline{u}_{i+1} + \overline{u}_{i+2})^2 + \frac{1421461}{1310400}(\overline{u}_{i-2} - 4\overline{u}_{i-1} + 6\overline{u}_i - 4\overline{u}_{i+1} + \overline{u}_{i+2})^2 \\
\beta_2 &= (\overline{u}_{i-1} - \overline{u}_i)^2 \\
\beta_3 &= (\overline{u}_i - \overline{u}_{i+1})^2
\end{aligned}$$

定义

$$\tau = \left(\frac{|\beta_1 - \beta_2| + |\beta_1 - \beta_3|}{2}\right)^2$$

则非线性权定义如下：

$$\omega_k = \frac{\tilde{\omega}_k}{\sum_{l=1}^{3}\tilde{\omega}_k}, \quad \tilde{\omega}_k = \gamma_k\left(1 + \frac{\tau}{\varepsilon + \beta_k}\right), \quad k = 1, 2, 3$$

利用非线性权对多项式进行组合最终可以得到对应五阶精度的空间离散：

$$u^-_{i+1/2} = \omega_1\left(\frac{1}{\gamma_1}p_1(x_{i+1/2}) - \frac{\gamma_2}{\gamma_1}p_2(x_{i+1/2}) - \frac{\gamma_3}{\gamma_1}p_3(x_{i+1/2})\right) + \omega_2 p_2(x_{i+1/2}) + \omega_3 p_3(x_{i+1/2})$$

3.2.1 一维三阶 WENO-ZQ 格式

一维三阶 WENO-ZQ 将会使用到一个大模板 $S_1=\{\Omega_{i-1},\Omega_i,\Omega_{i+1}\}$ 以及两个小模板 $S_2=\{\Omega_{i-1},\Omega_i\}$，$S_3=\{\Omega_i,\Omega_{i+1}\}$。对于一维问题，需要用两个高斯点来计算体积分，那么构造的二次多项式 $p_1(x)=a_0+a_1(x-x_i)+a_2(x-x_i)^2$ 就满足条件[1]

$$\overline{u}_{i-1}=\frac{1}{|\Omega_{i-1}|}\int_{\Omega_{i-1}}p_1(x)\mathrm{d}x=w_{i-1,1}\big(a_0+a_1(x_{i-1,1}-x_i)+a_2(x_{i-1,1}-x_i)^2\big)+w_{i-1,2}\big(a_0+a_1(x_{i-1,2}-x_i)+a_2(x_{i-1,2}-x$$

$$\overline{u}_{i}=\frac{1}{|\Omega_{i}|}\int_{\Omega_{i}}p_1(x)\mathrm{d}x=w_{i,1}\big(a_0+a_1(x_{i,1}-x_i)+a_2(x_{i,1}-x_i)^2\big)+w_{i,2}\big(a_0+a_1(x_{i,2}-x_i)+a_2(x_{i,2}-x_i)^2\big)$$

$$\overline{u}_{i+1}=\frac{1}{|\Omega_{i+1}|}\int_{\Omega_{i+1}}p_1(x)\mathrm{d}x=w_{i+1,1}\big(a_0+a_1(x_{i+1,1}-x_i)+a_2(x_{i+1,1}-x_i)^2\big)+w_{i+1,2}\big(a_0+a_1(x_{i+1,2}-x_i)+a_2(x_{i+1,2}-x$$

该条件可以写成矩阵的形式：

$$\begin{bmatrix}a_0\\a_1\\a_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\sum_{k=1}^2 w_{i-1,k} & \sum_{k=1}^2 w_{i-1,k}(x_{i-1,k}-x_i) & \sum_{k=1}^2 w_{i-1,k}(x_{i-1,k}-x_i)^2\\ \sum_{k=1}^2 w_{i,k} & \sum_{k=1}^2 w_{i,k}(x_{i,k}-x_i) & \sum_{k=1}^2 w_{i,k}(x_{i,k}-x_i)^2\\ \sum_{k=1}^2 w_{i+1,k} & \sum_{k=1}^2 w_{i+1,k}(x_{i+1,k}-x_i) & \sum_{k=1}^2 w_{i+1,k}(x_{i+1,k}-x_i)^2\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\overline{u}_{i-1}\\\overline{u}_i\\\overline{u}_{i+1}\end{bmatrix}$$

同理可以在两个小模板 S_2,S_3 上分别构造线性多项式 $p_2(x)=b_0+b_1(x-x_i)$ 和 $p_3(x)=c_0+c_1(x-x_i)$，其满足条件

$$\overline{u}_{i-1}=\frac{1}{|\Omega_{i-1}|}\int_{\Omega_{i-1}}p_2(x)\mathrm{d}x=w_{i-1,1}\big(b_0+b_1(x_{i-1,1}-x_i)\big)+w_{i-1,2}\big(b_0+b_1(x_{i-1,2}-x_i)\big)$$

$$\overline{u}_{i}=\frac{1}{|\Omega_{i}|}\int_{\Omega_{i}}p_2(x)\mathrm{d}x=w_{i,1}\big(b_0+b_1(x_{i,1}-x_i)\big)+w_{i,2}\big(b_0+b_1(x_{i,2}-x_i)\big)$$

$$\overline{u}_{i}=\frac{1}{|\Omega_{i}|}\int_{\Omega_{i}}p_3(x)\mathrm{d}x=w_{i,1}\big(c_0+c_1(x_{i,1}-x_i)\big)+w_{i,2}\big(c_0+c_1(x_{i,2}-x_i)\big)$$

$$\overline{u}_{i+1}=\frac{1}{|\Omega_{i+1}|}\int_{\Omega_{i+1}}p_3(x)\mathrm{d}x=w_{i+1,1}\big(c_0+c_1(x_{i+1,1}-x_i)\big)+w_{i+1,2}\big(c_0+c_1(x_{i+1,2}-x_i)\big)$$

同样可以将上述条件写成矩阵形式：

$$\begin{bmatrix}b_0\\b_1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\sum_{k=1}^2 w_{i-1,k} & \sum_{k=1}^2 w_{i,k}(x_{i-1,k}-x_i)\\ \sum_{k=1}^2 w_{i,k} & \sum_{k=1}^2 w_{i,k}(x_{i,k}-x_i)\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\overline{u}_{i-1}\\\overline{u}_i\end{bmatrix},\quad \begin{bmatrix}c_0\\c_1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\sum_{k=1}^2 w_{i,k} & \sum_{k=1}^2 w_{i,k}(x_{i,k}-x_i)\\ \sum_{k=1}^2 w_{i+1,k} & \sum_{k=1}^2 w_{i+1,k}(x_{i+1,k}-x_i)\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\overline{u}_i\\\overline{u}_{i+1}\end{bmatrix}$$

根据文献，线性权可以简单地选择为 $\gamma_1=0.98$，$\gamma_2=0.01$，$\gamma_3=0.01$。现在计算各模板的光滑指示器：

$$\begin{aligned}\beta_1&=|\Omega_i|\int_{\Omega_i}\left(\frac{\mathrm{d}p_1(x)}{\mathrm{d}x}\right)^2\mathrm{d}x+|\Omega_i|^3\int_{\Omega_i}\left(\frac{\mathrm{d}^2p_1(x)}{\mathrm{d}x^2}\right)^2\mathrm{d}x\\&=|\Omega_i|\int_{\Omega_i}\big(a_1+2a_2(x-x_i)\big)^2\mathrm{d}x+|\Omega_i|^3\int_{\Omega_i}(2a_2)^2\mathrm{d}x\\&=|\Omega_i|\sum_{k=1}^2 w_{i,k}\big(a_1+2a_2(x_{i,k}-x_i)\big)^2+|\Omega_i|^4 4a_2^2\end{aligned}$$

$$\beta_2=|\Omega_i|\int_{\Omega_i}\left(\frac{\mathrm{d}p_2(x)}{\mathrm{d}x}\right)^2\mathrm{d}x=|\Omega_i|\int_{\Omega_i}(b_1)^2\mathrm{d}x=|\Omega_i|^2b_1^2$$

$$\beta_3=|\Omega_i|\int_{\Omega_i}\left(\frac{\mathrm{d}p_3(x)}{\mathrm{d}x}\right)^2\mathrm{d}x=|\Omega_i|\int_{\Omega_i}(c_1)^2\mathrm{d}x=|\Omega_i|^2c_1^2$$

从而可以算出

$$\tau=\left(\frac{|\beta_1-\beta_2|+|\beta_1-\beta_3|}{2}\right)^2$$

以及非线性权：

$$\omega_1=\frac{\tilde{\omega}_1}{\tilde{\omega}_1+\tilde{\omega}_2+\tilde{\omega}_3},\quad \omega_2=\frac{\tilde{\omega}_2}{\tilde{\omega}_1+\tilde{\omega}_2+\tilde{\omega}_3},\quad \omega_3=\frac{\tilde{\omega}_3}{\tilde{\omega}_1+\tilde{\omega}_2+\tilde{\omega}_3}$$

[1] 将多项式中心移动到 x_i 能够有效避免坐标值较大、间距较小时引起矩阵求逆病态的问题。

其中

$$\tilde{\omega}_1=\gamma_1\Big(1+\frac{\tau}{\varepsilon+\beta_1}\Big),\quad \tilde{\omega}_2=\gamma_2\Big(1+\frac{\tau}{\varepsilon+\beta_2}\Big),\quad \tilde{\omega}_3=\gamma_3\Big(1+\frac{\tau}{\varepsilon+\beta_3}\Big)$$

所以最终可以得到网格 Ω_i 内的具有三阶精度的重构多项式：

$$\begin{aligned}u(x)=\omega_1\Big(&\frac{1}{\gamma_1}\big(a_0+a_1(x-x_i)+a_2(x-x_i)^2\big)-\frac{\gamma_2}{\gamma_1}\big(b_0+b_1(x-x_i)\big)-\frac{\gamma_3}{\gamma_1}\big(c_0+c_1(x-x_i)\big)\Big)\\&+\omega_2\big(b_0+b_1(x-x_i)\big)+\omega_3\big(c_0+c_1(x-x_i)\big)\end{aligned}$$

3.2.2 二维三阶 WENO-ZQ 格式

二维三阶 WENO-ZQ 将会使用到一个包含 6 个单元的大模板 $S_1=\{\Omega_{11},\Omega_{12},\Omega_{13},\Omega_{14},\Omega_{15},\Omega_{16}\}$ 以及三个包含 3 个单元的小模板 $S_2=\{\Omega_{21},\Omega_{22},\Omega_{23}\}$，$S_3=\{\Omega_{31},\Omega_{32},\Omega_{33}\}$ 和 $S_4=\{\Omega_{41},\Omega_{42},\Omega_{43}\}$，其中第一个下标表示所在的模板、第二个下标表示模板中的位置。为了简单起见，将仅使用一个位于体心的高斯点来近似体积分，那么构造的二次多项式 $p_1(x,y)=a_0+a_1x+a_2y+a_3xy+a_4x^2+a_5y^2$ 就满足条件

$$\bar{u}_{11}=\frac{1}{|\Omega_{11}|}\int_{\Omega_{11}}p_1(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\approx a_0+a_1x_{11}+a_2y_{11}+a_3x_{11}y_{11}+a_4x_{11}^2+a_5y_{11}^2$$
$$\bar{u}_{12}=\frac{1}{|\Omega_{12}|}\int_{\Omega_{12}}p_1(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\approx a_0+a_1x_{12}+a_2y_{12}+a_3x_{12}y_{12}+a_4x_{12}^2+a_5y_{12}^2$$
$$\bar{u}_{13}=\frac{1}{|\Omega_{13}|}\int_{\Omega_{13}}p_1(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\approx a_0+a_1x_{13}+a_2y_{13}+a_3x_{13}y_{13}+a_4x_{13}^2+a_5y_{13}^2$$
$$\bar{u}_{14}=\frac{1}{|\Omega_{14}|}\int_{\Omega_{14}}p_1(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\approx a_0+a_1x_{14}+a_2y_{14}+a_3x_{14}y_{14}+a_4x_{14}^2+a_5y_{14}^2$$
$$\bar{u}_{15}=\frac{1}{|\Omega_{15}|}\int_{\Omega_{15}}p_1(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\approx a_0+a_1x_{15}+a_2y_{15}+a_3x_{15}y_{15}+a_4x_{15}^2+a_5y_{15}^2$$
$$\bar{u}_{16}=\frac{1}{|\Omega_{16}|}\int_{\Omega_{16}}p_1(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\approx a_0+a_1x_{16}+a_2y_{16}+a_3x_{16}y_{16}+a_4x_{16}^2+a_5y_{16}^2$$

可以将该条件写成矩阵的形式：

$$\begin{bmatrix}a_0\\a_1\\a_2\\a_3\\a_4\\a_5\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&x_{11}&y_{11}&x_{11}y_{11}&x_{11}^2&y_{11}^2\\1&x_{12}&y_{12}&x_{12}y_{12}&x_{12}^2&y_{12}^2\\1&x_{13}&y_{13}&x_{13}y_{13}&x_{13}^2&y_{13}^2\\1&x_{14}&y_{14}&x_{14}y_{14}&x_{14}^2&y_{14}^2\\1&x_{15}&y_{15}&x_{15}y_{15}&x_{15}^2&y_{15}^2\\1&x_{16}&y_{16}&x_{16}y_{16}&x_{16}^2&y_{16}^2\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\bar{u}_{11}\\\bar{u}_{12}\\\bar{u}_{13}\\\bar{u}_{14}\\\bar{u}_{15}\\\bar{u}_{16}\end{bmatrix}$$

同理可以在三个小模板 S_2,S_3 上分别构造线性多项式 $p_2(x,y)=b_0+b_1x+b_2y$ 和 $p_3(x,y)=c_0+c_1x+c_2y$ 和 $p_4(x,y)=d_0+d_1x+d_2y$，其满足条件

$$\bar{u}_{21}=\frac{1}{|\Omega_{21}|}\int_{\Omega_{21}}p_2(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\approx b_0+b_1x_{21}+b_2y_{21}$$
$$\bar{u}_{22}=\frac{1}{|\Omega_{22}|}\int_{\Omega_{22}}p_2(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\approx b_0+b_1x_{22}+b_2y_{22}$$
$$\bar{u}_{23}=\frac{1}{|\Omega_{23}|}\int_{\Omega_{23}}p_2(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\approx b_0+b_1x_{23}+b_2y_{23}$$

$$\bar{u}_{31}=\frac{1}{|\Omega_{31}|}\int_{\Omega_{31}}p_3(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\approx c_0+c_1x_{31}+c_2y_{31}$$
$$\bar{u}_{32}=\frac{1}{|\Omega_{32}|}\int_{\Omega_{32}}p_3(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\approx c_0+c_1x_{32}+c_2y_{32}$$
$$\bar{u}_{33}=\frac{1}{|\Omega_{33}|}\int_{\Omega_{33}}p_3(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\approx c_0+c_1x_{33}+c_2y_{33}$$

$$
\begin{aligned}
\bar{u}_{41} &= \frac{1}{|\Omega_{41}|}\int_{\Omega_{41}} p_4(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y \approx d_0 + d_1x_{41} + d_2y_{41} \\
\bar{u}_{42} &= \frac{1}{|\Omega_{42}|}\int_{\Omega_{42}} p_4(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y \approx d_0 + d_1x_{42} + d_2y_{42} \\
\bar{u}_{43} &= \frac{1}{|\Omega_{43}|}\int_{\Omega_{43}} p_4(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y \approx d_0 + d_1x_{43} + d_2y_{43}
\end{aligned}
$$

同样可以将上述条件写成矩阵形式：

$$
\begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_{21} & y_{21} \\ 1 & x_{22} & y_{22} \\ 1 & x_{23} & y_{23} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \bar{u}_{21} \\ \bar{u}_{22} \\ \bar{u}_{23} \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_{31} & y_{31} \\ 1 & x_{32} & y_{32} \\ 1 & x_{33} & y_{33} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \bar{u}_{31} \\ \bar{u}_{32} \\ \bar{u}_{33} \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} d_0 \\ d_1 \\ d_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_{41} & y_{41} \\ 1 & x_{42} & y_{42} \\ 1 & x_{43} & y_{43} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \bar{u}_{41} \\ \bar{u}_{42} \\ \bar{u}_{43} \end{bmatrix}
$$

根据文献，线性权可以简单地选择为 $\gamma_1 = 0.97$ ， $\gamma_2 = \gamma_3 = \gamma_4 = 0.01$ 。现在计算各模板的光滑指示器：

$$
\begin{aligned}
\beta_1 = &\int_{\Omega_i}\Big(\frac{\partial p_1(x,y)}{\partial x}\Big)^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y + \int_{\Omega_i}\Big(\frac{\partial p_1(x,y)}{\partial y}\Big)^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y + |\Omega_i|\int_{\Omega_i}\Big(\frac{\partial^2 p_1(x,y)}{\partial x\partial y}\Big)^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y + |\Omega_i|\int_{\Omega_i}\Big(\frac{\partial^2 p_1(x,y)}{\partial x^2}\Big)^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y + |\Omega_i|\int_{\Omega_i}\Big(\\
= &\int_{\Omega_i}(a_1 + a_3y + 2a_4x)^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y + \int_{\Omega_i}(a_2 + a_3x + 2a_5y)^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y + |\Omega_i|\int_{\Omega_i}(a_3)^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y + |\Omega_i|\int_{\Omega_i}(2a_4)^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y + |\Omega_i|\int_{\Omega_i}(2a_5)^2\mathrm{d}x \\
\approx &|\Omega_i|(a_1 + a_3y_i + 2a_4x_i)^2 + |\Omega_i|(a_2 + a_3x_i + 2a_5y_i)^2 + |\Omega_i|^2a_3^2 + |\Omega_i|^2 4a_4^2 + |\Omega_i|^2 4a_5^2
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\beta_2 &= \int_{\Omega_i}\Big(\frac{\partial p_2(x,y)}{\partial x}\Big)^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y + \int_{\Omega_i}\Big(\frac{\partial p_2(x,y)}{\partial y}\Big)^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y = \int_{\Omega_i}(b_1)^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y + \int_{\Omega_i}(b_2)^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y \approx |\Omega_i|b_1^2 + |\Omega_i|b_2^2 \\
\beta_3 &= \int_{\Omega_i}\Big(\frac{\partial p_3(x,y)}{\partial x}\Big)^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y + \int_{\Omega_i}\Big(\frac{\partial p_3(x,y)}{\partial y}\Big)^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y = \int_{\Omega_i}(c_1)^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y + \int_{\Omega_i}(c_2)^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y \approx |\Omega_i|c_1^2 + |\Omega_i|c_2^2 \\
\beta_4 &= \int_{\Omega_i}\Big(\frac{\partial p_4(x,y)}{\partial x}\Big)^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y + \int_{\Omega_i}\Big(\frac{\partial p_4(x,y)}{\partial y}\Big)^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y = \int_{\Omega_i}(d_1)^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y + \int_{\Omega_i}(d_2)^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y \approx |\Omega_i|d_1^2 + |\Omega_i|d_2^2
\end{aligned}
$$

从而可以算出

$$
\tau = \Big(\frac{|\beta_1 - \beta_2| + |\beta_1 - \beta_3| + |\beta_1 - \beta_4|}{3}\Big)^2
$$

以及非线性权：

$$
\omega_k = \frac{\tilde{\omega}_k}{\sum_{k=1}^{4}\tilde{\omega}_k}, \quad \tilde{\omega}_k = \gamma_k\Big(1 + \frac{\tau}{\varepsilon + \beta_k}\Big)
$$

所以最终可以得到网格 Ω_i 内的具有三阶精度的重构多项式：

$$
\begin{aligned}
u(x,y) = &\omega_1\Big(\frac{1}{\gamma_1}(a_0 + a_1x + a_2y + a_3xy + a_4x^2 + a_5y^2) - \frac{\gamma_2}{\gamma_1}(b_0 + b_1x + b_2y) - \frac{\gamma_3}{\gamma_1}(c_0 + c_1x + c_2y) - \frac{\gamma_4}{\gamma_4}(d_0 + d_1x + d_2y)\Big) \\
&+ \omega_2(b_0 + b_1x + b_2y) + \omega_3(c_0 + c_1x + c_2y) + \omega_4(d_0 + d_1x + d_2y)
\end{aligned}
$$

第 4 章 RBF 重构

4.1 界面值重构

在有限体积框架下的增量 RBF 重构可以写成

$$u_i(\vec{x}) = \overline{u}_{\text{avg}} + \sum_{i=1}^{N} \omega_i \varphi(|\vec{x} - \vec{x}_i|)$$

其中 N 表示在重构模板 $S(i)$ 中网格的数量，并且第一个网格总是其自身；$\overline{u}_{\text{avg}} = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} \overline{u}_j$ 是模板内场量体平均值的算数平均；$\varphi(|\vec{x} - \vec{x}_i|)$ 表示 RBF 基函数以及 ω_i 是各基函数对应的权重。研究表明 MQ 基函数的精度要比其他基函数更好，所以一般都采用

$$\varphi(r) = \sqrt{c + (r/r_{\text{avg}})^2}$$

其中 c 是形参数，一般取为 10.0；当地尺度 $r_{\text{avg}} = \frac{1}{N-1}\sum\limits_{i \in S(i), i \neq 1} |\vec{x}_i - \vec{x}_1|$ 与网格拓扑有关且 $\vec{x}_1$ 表示当前网格的体心位置。各基函数的权重可以由下面的关系确定：

$$\frac{1}{|\Omega_i|}\int_{\Omega_i} \sum_{j=1}^{N} \omega_j \varphi(|\vec{x} - \vec{x}_j|)\mathrm{d}\vec{x} = \overline{u}_i - \overline{u}_{\text{avg}}$$

并且该关系可以写成 $\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\omega} = \Delta\overline{\mathbf{u}} = \overline{\mathbf{u}} - \overline{\mathbf{u}}_{\text{avg}}$ 的矩阵形式：

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{|\Omega_1|}\int_{\Omega_1} \varphi(|\vec{x} - \vec{x}_1|)\mathrm{d}\vec{x} & \cdots & \frac{1}{|\Omega_1|}\int_{\Omega_1} \varphi(|\vec{x} - \vec{x}_N|)\mathrm{d}\vec{x} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{|\Omega_N|}\int_{\Omega_N} \varphi(|\vec{x} - \vec{x}_1|)\mathrm{d}\vec{x} & \cdots & \frac{1}{|\Omega_N|}\int_{\Omega_N} \varphi(|\vec{x} - \vec{x}_N|)\mathrm{d}\vec{x} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \omega_1 \\ \vdots \\ \omega_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \overline{u}_1 - \overline{u}_{\text{avg}} \\ \vdots \\ \overline{u}_N - \overline{u}_{\text{avg}} \end{bmatrix}$$

在这里，体积分是通过 Gauss Quadrature 完成的，并且考虑到相容性的要求一般建议使用 7 阶高斯积分。只要我们在前处理阶段存储了 $\boldsymbol{\Phi}^{-1}$，各基函数的权重就能够很容易地计算出来，在目标位置的重构值也就自然地可以计算出来。

然而，由于逆矩阵 $\boldsymbol{\Phi}^{-1}$ 是一个方阵，上述传统的计算方式会需要非常多的内存来存储这些信息，而且在模拟过程中还要多次计算昂贵的矩阵乘法以及基函数本身的计算。下面考虑对其进行进一步的优化。首先，对于一个给定位置，其重构值 u_k 可以表示为

$$u_k = \overline{u}_{\text{avg}} + \sum_{i=1}^{N} \omega_i \varphi_i = \overline{u}_{avg} + \boldsymbol{\varphi}^T \left[\boldsymbol{\Phi}^{-1}(\overline{\mathbf{u}} - \overline{\mathbf{u}}_{\text{avg}})\right]$$

其中 T 表示矩阵转置。注意到平均值 $\overline{u}_{\text{avg}}$ 可以写成 $\overline{u}_{\text{avg}} = \frac{1}{N}\mathbf{E}^T\mathbf{u}$，其中 $\mathbf{E}$ 是一个全一的列向量；$\overline{\mathbf{u}}_{\text{avg}}$ 也可以类似地写成 $\overline{\mathbf{u}}_{\text{avg}} = \frac{1}{N}\mathbf{U}\overline{\mathbf{u}}$ 是一个全一的方阵。因此，重构值 u_k 可以进一步写成

$$\begin{aligned} u_k &= \frac{1}{N}\mathbf{E}^T\overline{\mathbf{u}} + \boldsymbol{\varphi}^T\boldsymbol{\Phi}^{-1}\overline{u} - \frac{1}{N}\boldsymbol{\varphi}^T\boldsymbol{\Phi}^{-1}\mathbf{U}\overline{\mathbf{u}} \\ &= \left(\frac{1}{N}E + (\boldsymbol{\Phi}^{-1})^T\boldsymbol{\varphi} - \frac{1}{N}\mathbf{U}^T(\boldsymbol{\Phi}^{-1})^T\boldsymbol{\varphi}\right)^T\overline{\mathbf{u}} \\ &= \mathbf{B}^T\overline{\mathbf{u}} \end{aligned}$$

经过上述修改，逆矩阵 $\boldsymbol{\Phi}^{-1}$ 就不再需要存储，并将重构过程转换成了一种插值过程。现在 $\mathbf{B}$ 表示模板内各值对重构值的贡献权重，并且它可以在前处理的过程中存储下来。与原本的传统计算方式相比，新的实现方式能够显著降低数据存储量以及规避模拟演化过程中昂贵的矩阵乘法以及基函数计算。

4.2 界面梯度重构

以二维的情况为例，对于增量 RBF 重构，其值重构分布为

$$u(x,y)=\overline{u}_{\text{avg}}+\sum_i\omega_i\sqrt{c+(\frac{x-x_i}{r_{\text{avg}}})^2+(\frac{y-y_i}{r_{\text{avg}}})^2}=\overline{u}_{\text{avg}}+\sum_i\omega_i\varphi_i$$

那么界面的梯度值则为

$$\frac{\partial u(x,y)}{\partial x}=\sum_i\omega_i\cdot\frac{1}{2}\Big[c+(\frac{x-x_i}{r_{\text{avg}}})^2+(\frac{y-y_i}{r_{\text{avg}}})^2\Big]^{-1/2}\cdot 2(\frac{x-x_i}{r_{\text{avg}}})\cdot\frac{1}{r_{\text{avg}}}=\sum_i\omega_i\cdot\frac{x-x_i}{r_{\text{avg}}^2\cdot\varphi_i}$$

$$\frac{\partial u(x,y)}{\partial y}=\sum_i\omega_i\cdot\frac{1}{2}\Big[c+(\frac{x-x_i}{r_{\text{avg}}})^2+(\frac{y-y_i}{r_{\text{avg}}})^2\Big]^{-1/2}\cdot 2(\frac{y-y_i}{r_{\text{avg}}})\cdot\frac{1}{r_{\text{avg}}}=\sum_i\omega_i\cdot\frac{y-y_i}{r_{\text{avg}}^2\cdot\varphi_i}$$

自然可以按照上一节描述的操作来将上述重构过程转换为插值过程，但是，如果仍然按照上一节的直接推导来完成，会发现每个分量方向的权重表达并不相同，这将导致每个方向的梯度需要存储各自的权重向量，从而使得内存与计算量节省的效果大大削弱。因此，此时需要采用另一种表达方式。以模板有三个单元的二维情况为例，有

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial x}&=\begin{bmatrix}\frac{x-x_1}{r_{\text{avg}}^2\varphi_1}&\frac{x-x_2}{r_{\text{avg}}^2\varphi_2}&\frac{x-x_3}{r_{\text{avg}}^2\varphi_3}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\Phi'_{11}&\Phi'_{12}&\Phi'_{13}\\\Phi'_{21}&\Phi'_{22}&\Phi'_{23}\\\Phi'_{31}&\Phi'_{32}&\Phi'_{33}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}u_1-\overline{u}_{\text{avg}}\\u_2-\overline{u}_{\text{avg}}\\u_3-\overline{u}_{\text{avg}}\end{bmatrix}\\
&=\frac{\Phi'_{11}}{r_{\text{avg}}^2\varphi_1}(u_1-\overline{u}_{\text{avg}})(x-x_1)+\frac{\Phi'_{12}}{r_{\text{avg}}^2\varphi_1}(u_2-\overline{u}_{\text{avg}})(x-x_1)+\frac{\Phi'_{13}}{r_{\text{avg}}^2\varphi_1}(u_3-\overline{u}_{\text{avg}})(x-x_1)\\
&\quad+\frac{\Phi'_{21}}{r_{\text{avg}}^2\varphi_2}(u_1-\overline{u}_{\text{avg}})(x-x_2)+\frac{\Phi'_{22}}{r_{\text{avg}}^2\varphi_2}(u_2-\overline{u}_{\text{avg}})(x-x_2)+\frac{\Phi'_{23}}{r_{\text{avg}}^2\varphi_2}(u_3-\overline{u}_{\text{avg}})(x-x_2)\\
&\quad+\frac{\Phi'_{31}}{r_{\text{avg}}^2\varphi_3}(u_1-\overline{u}_{\text{avg}})(x-x_3)+\frac{\Phi'_{32}}{r_{\text{avg}}^2\varphi_3}(u_2-\overline{u}_{\text{avg}})(x-x_3)+\frac{\Phi'_{33}}{r_{\text{avg}}^2\varphi_3}(u_3-\overline{u}_{\text{avg}})(x-x_3)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial y}&=\begin{bmatrix}\frac{y-y_1}{r_{\text{avg}}^2\varphi_1}&\frac{y-y_2}{r_{\text{avg}}^2\varphi_2}&\frac{y-y_3}{r_{\text{avg}}^2\varphi_3}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\Phi'_{11}&\Phi'_{12}&\Phi'_{13}\\\Phi'_{21}&\Phi'_{22}&\Phi'_{23}\\\Phi'_{31}&\Phi'_{32}&\Phi'_{33}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}u_1-\overline{u}_{\text{avg}}\\u_2-\overline{u}_{\text{avg}}\\u_3-\overline{u}_{\text{avg}}\end{bmatrix}\\
&=\frac{\Phi'_{11}}{r_{\text{avg}}^2\varphi_1}(u_1-\overline{u}_{\text{avg}})(y-y_1)+\frac{\Phi'_{12}}{r_{\text{avg}}^2\varphi_1}(u_2-\overline{u}_{\text{avg}})(y-y_1)+\frac{\Phi'_{13}}{r_{\text{avg}}^2\varphi_1}(u_3-\overline{u}_{\text{avg}})(y-y_1)\\
&\quad+\frac{\Phi'_{21}}{r_{\text{avg}}^2\varphi_2}(u_1-\overline{u}_{\text{avg}})(y-y_2)+\frac{\Phi'_{22}}{r_{\text{avg}}^2\varphi_2}(u_2-\overline{u}_{\text{avg}})(y-y_2)+\frac{\Phi'_{23}}{r_{\text{avg}}^2\varphi_2}(u_3-\overline{u}_{\text{avg}})(y-y_2)\\
&\quad+\frac{\Phi'_{31}}{r_{\text{avg}}^2\varphi_3}(u_1-\overline{u}_{\text{avg}})(y-y_3)+\frac{\Phi'_{32}}{r_{\text{avg}}^2\varphi_3}(u_2-\overline{u}_{\text{avg}})(y-y_3)+\frac{\Phi'_{33}}{r_{\text{avg}}^2\varphi_3}(u_3-\overline{u}_{\text{avg}})(y-y_3)\end{aligned}$$

第 5 章 粘性项离散

5.1 梯度项的计算

5.1.1 Green-Gauss 方法

首先考虑对一个一般的向量 $\vec{B}$ 应用散度定理:

$$\int_V \nabla\cdot\vec{B}\mathrm{d}V = \int_{\partial V}\vec{B}\cdot\vec{n}\mathrm{d}S$$

针对这个关系，可以让 $\vec{B}=T\vec{C}$，即一个标量乘以一个向量，此时就有

$$\int_V [T(\nabla\cdot\vec{C})]\mathrm{d}V + \int_V [(\nabla T)\cdot\vec{C}]\mathrm{d}V = \int_{\partial V}[T(\vec{C}\cdot\vec{n})]\mathrm{d}S + \int_{\partial V}[(T\vec{n})\cdot\vec{C}]\mathrm{d}S$$

然后令 $\vec{C}$ 为单位向量，此时

$$\int_V [T(\nabla\cdot\vec{C})]\mathrm{d}V = 0,\quad \int_{\partial V}[T(\vec{C}\cdot\vec{n})]\mathrm{d}S = 0$$

于是方程可以化简为

$$\int_V [\nabla T]\mathrm{d}V = \int_{\partial V}[T\vec{n}]\mathrm{d}S$$

因此基于有限体积法，对于一个体心网格单元，任何一个量的梯度都可以表示为

$$(\nabla T)_p = \frac{1}{\Omega_p}\sum_N [T_f\vec{n}_f S_f],\quad (\nabla\vec{U})_p = \frac{1}{\Omega_p}[\vec{U}_f\otimes\vec{n}_f S_f]$$

5.1.2 最小二乘法

使用最小二乘法计算体心梯度的时候，对于二维的情况，有

$$\phi_0 + \frac{\partial\phi}{\partial x}(x_j - x_0) + \frac{\partial\phi}{\partial y}(y_j - y_0) = \phi_j$$

上式对于每个界面都成立，于是可以写成矩阵的形式:

$$\begin{bmatrix} x_1-x_0 & y_1-y_0\\ x_2-x_0 & y_2-y_0\\ x_3-x_0 & y_3-y_0\\ x_4-x_0 & y_4-y_0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{\partial\phi}{\partial x}\\ \frac{\partial\phi}{\partial y}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\phi_1-\phi_0\\ \phi_2-\phi_0\\ \phi_3-\phi_0\\ \phi_4-\phi_0\end{bmatrix}$$

于是

$$\begin{bmatrix} x_1-x_0 & x_2-x_0 & x_3-x_0 & x_4-x_0\\ y_1-y_0 & y_2-y_0 & y_3-y_0 & y_4-y_0\end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1-x_0 & y_1-y_0\\ x_2-x_0 & y_2-y_0\\ x_3-x_0 & y_3-y_0\\ x_4-x_0 & y_4-y_0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{\partial\phi}{\partial x}\\ \frac{\partial\phi}{\partial y}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1-x_0 & x_2-x_0 & x_3-x_0 & x_4-x_0\\ y_1-y_0 & y_2-y_0 & y_3-y_0 & y_4-y_0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\phi_1-\phi_0\\ \phi_2-\phi_0\\ \phi_3-\phi_0\\ \phi_4-\phi_0\end{bmatrix}$$

对左边的系数矩阵求逆，得到

$$\begin{bmatrix}\sum_{j=1}^4(x_j-x_0)^2 & \sum_{j=1}^4(x_j-x_0)(y_j-y_0)\\ \sum_{j=1}^4(x_j-x_0)(y_j-y_0) & \sum_{j=1}^4(y_j-y_0)^2\end{bmatrix}^{-1} = \frac{1}{S_{xx}S_{yy}-S_{xy}S_{yx}}\begin{bmatrix}S_{yy} & -S_{xy}\\ -S_{yx} & S_{xx}\end{bmatrix}$$

最终得到梯度的计算表达式为

$$\begin{bmatrix}\frac{\partial\phi}{\partial x}\\ \frac{\partial\phi}{\partial y}\end{bmatrix} = \sum_{j=1}^4\frac{1}{S_{xx}S_{yy}-S_{xy}S_{yx}}\begin{bmatrix}S_{yy}(x_j-x_0)-S_{xy}(y_j-y_0)\\ -S_{yx}(x_j-x_0)+S_{xx}(y_j-y_0)\end{bmatrix}(\phi_j-\phi_0)$$

对于三维的情况也是类似，考虑

$$\begin{bmatrix} x_1-x_0 & y_1-y_0 & z_1-z_0 \\ x_2-x_0 & y_2-y_0 & z_2-z_0 \\ x_3-x_0 & y_3-y_0 & z_3-z_0 \\ x_4-x_0 & y_4-y_0 & z_4-z_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial\phi}{\partial x} \\ \frac{\partial\phi}{\partial y} \\ \frac{\partial\phi}{\partial z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_1-\phi_0 \\ \phi_2-\phi_0 \\ \phi_3-\phi_0 \\ \phi_4-\phi_0 \end{bmatrix}$$

系数矩阵求逆为

$$\begin{bmatrix} \sum_{j=1}^4 (x_j-x_0)^2 & \sum_{j=1}^4 (x_j-x_0)(y_j-y_0) & \sum_{j=1}^4 (x_j-x_0)(z_j-z_0) \\ \sum_{j=1}^4 (x_j-x_0)(y_j-y_0) & \sum_{j=1}^4 (y_j-y_0)^2 & \sum_{j=1}^4 (y_j-y_0)(z_j-z_0) \\ \sum_{j=1}^4 (x_j-x_0)(z_j-z_0) & \sum_{j=1}^4 (y_j-y_0)(z_j-z_0) & \sum_{j=1}^4 (z_j-z_0)^2 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} S_{xx} & S_{xy} & S_{xz} \\ S_{xy} & S_{yy} & S_{yz} \\ S_{xz} & S_{yz} & S_{zz} \end{bmatrix}^{-1}$$

$$= \frac{1}{|\mathbf{S}|} \begin{bmatrix} S_{yy}S_{zz}-S_{yz}^2 & S_{yz}S_{xz}-S_{xy}S_{zz} & S_{xy}S_{yz}-S_{yy}S_{xz} \\ S_{yz}S_{xz}-S_{xy}S_{zz} & S_{xx}S_{zz}-S_{xz}^2 & S_{xy}S_{xz}-S_{xx}S_{yz} \\ S_{xy}S_{yz}-S_{yy}S_{xz} & S_{xy}S_{xz}-S_{xx}S_{yz} & S_{xx}S_{yy}-S_{xy}^2 \end{bmatrix}$$

其中 $|\mathbf{S}| = S_{xx}S_{yy}S_{zz} + S_{xy}S_{yz}S_{xz} + S_{xz}S_{xy}S_{yz} - S_{xz}^2S_{yy} - S_{xy}^2S_{zz} - S_{xx}S_{yz}^2$。从而最终得到梯度的计算表达式为

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial\phi}{\partial x} \\ \frac{\partial\phi}{\partial y} \\ \frac{\partial\phi}{\partial z} \end{bmatrix} = \sum_{j=1}^4 \frac{1}{|\mathbf{S}|} \begin{bmatrix} (S_{yy}S_{zz}-S_{yz}^2)(x_j-x_0) + (S_{yz}S_{xz}-S_{xy}S_{zz})(y_j-y_0) + (S_{xy}S_{yz}-S_{yy}S_{xz})(z_j-z_0) \\ (S_{yz}S_{xz}-S_{xy}S_{zz})(x_j-x_0) + (S_{xx}S_{zz}-S_{xz}^2)(y_j-y_0) + (S_{xy}S_{xz}-S_{xx}S_{yz})(z_j-z_0) \\ (S_{xy}S_{yz}-S_{yy}S_{xz})(x_j-x_0) + (S_{xy}S_{xz}-S_{xx}S_{yz})(y_j-y_0) + (S_{xx}S_{yy}-S_{xy}^2)(z_j-z_0) \end{bmatrix} (\phi_j-\phi_0)$$

5.2 应力张量的散度的分裂处理

对动量方程当中的粘性应力张量的散度的处理对于取得稳定的解至关重要：

$$\nabla\cdot\boldsymbol{\tau} = \nabla\cdot\left[2\mu\left(\frac{\nabla\vec{U}+(\nabla\vec{U})^T}{2} - \frac{1}{3}\nabla\cdot\vec{U}\mathbf{I}\right)\right]$$

其中存在恒等式

$$\nabla\cdot\vec{U} = \mathrm{tr}(\nabla\vec{U}) = \mathrm{tr}\left((\nabla\vec{U})^T\right)$$

因此可以将粘性应力张量的散度重新整理为

$$\begin{aligned} \nabla\cdot\boldsymbol{\tau} &= \nabla\cdot\left[\mu\nabla\vec{U} + \mu\left((\nabla\vec{U})^T - \frac{2}{3}\mathrm{tr}\left((\nabla\vec{U})^T\right)\mathbf{I}\right)\right] \\ &= \nabla\cdot(\mu\nabla\vec{U}) + \nabla\cdot\left[\mu\left((\nabla\vec{U})^T - \frac{2}{3}\mathrm{tr}\left((\nabla\vec{U})^T\right)\mathbf{I}\right)\right] \end{aligned}$$

这样将粘性应力张量的散度拆分为两部分后，可以对第一项作隐式处理，第二项作显式处理。

第 6 章 时间推进格式

6.1 SSP Runge-Kutta 方法

参考Strong Stability-Preserving High-Order Time Discretization Methods。考虑到 CFL 系数和 $\tilde{L}$ 成本的最佳强稳定性保持 Runge-Kutta 方法如下：如果要求 $\beta_k \geq 0$ ，那么一个最佳二阶 SSP Runge-Kutta 方法为

$$\begin{aligned} u^{(1)} &= u^n + \Delta t L(u^n) \\ u^{n+1} &= \frac{1}{2}u^n + \frac{1}{2}u^{(1)} + \frac{1}{2}\Delta t L(u^{(1)}) \end{aligned}$$

其 CFL 系数 $c = 1$ 。一个最佳三阶 SSP Runge-Kutta 方法为

$$\begin{aligned} u^{(1)} &= u^n + \Delta t L(u^n) \\ u^{(2)} &= \frac{3}{4}u^n + \frac{1}{4}u^{(1)} + \frac{1}{4}\Delta t L(u^{(1)}) \\ u^{n+1} &= \frac{1}{3}u^n + \frac{2}{3}u^{(2)} + \frac{2}{3}\Delta t L(u^{(2)}) \end{aligned}$$

其 CFL 系数 $c = 1$ 。

6.2 通量 Jacobi 矩阵

在隐式时间推进格式中，其中一个很重要的内容就是通量 Jacobi 矩阵，它直接决定了方程线化的准确程度。这里讨论二维无粘流动中任意面积元的法向通量对守恒变量的 Jacobi 矩阵的推导过程。二维无粘流动的控制方程可以写为

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_\Omega \vec{W}\mathrm{d}\Omega + \int_\Omega \mathbf{F}\cdot\vec{n}\mathrm{d}S = \vec{0}$$

其中守恒变量 $\vec{W} = (\rho, \rho u, \rho v, \rho e_t)^T$ ，无粘通量则为

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho uu + p \\ \rho uv \\ \rho u h_t \end{bmatrix}\vec{i} + \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho vv + p \\ \rho v h_t \end{bmatrix}\vec{j}$$

对于二维流场守恒变量 $\vec{W}$ ，它们应当视为相互独立的整体变量，其之间的偏导数始终为零。

计算任意面积元法向通量 $\vec{H}$ 的表达式为

$$\vec{H} = \mathbf{F}\cdot\vec{n} = \begin{bmatrix} \rho u n_x + \rho v n_y \\ (\rho uu + p)n_x + \rho uv n_y \\ \rho uv n_x + (\rho vv + p)n_y \\ \rho u h_t n_x + \rho v h_t n_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \\ h_3 \\ h_4 \end{bmatrix}$$

考虑 h_1 对各守恒变量的偏导数，有

$$\begin{aligned} \frac{\partial h_1}{\partial \rho} &= \frac{\partial(\rho u n_x + \rho v n_y)}{\partial \rho} = \frac{\partial(\rho u)}{\partial \rho}n_x + \frac{\partial(\rho v)}{\partial \rho}n_y = 0 \\ \frac{\partial h_1}{\partial(\rho u)} &= \frac{\partial(\rho u n_x + \rho v n_y)}{\partial(\rho u)} = \frac{\partial(\rho u)}{\partial(\rho u)}n_x + \frac{\partial(\rho v)}{\partial(\rho u)}n_y = n_x \\ \frac{\partial h_1}{\partial(\rho v)} &= \frac{\partial(\rho u n_x + \rho v n_y)}{\partial(\rho v)} = \frac{\partial(\rho u)}{\partial(\rho v)}n_x + \frac{\partial(\rho v)}{\partial(\rho v)}n_y = n_y \\ \frac{\partial h_1}{\partial(\rho e_t)} &= \frac{\partial(\rho u n_x + \rho v n_y)}{\partial(\rho e_t)} = \frac{\partial(\rho u)}{\partial(\rho e_t)}n_x + \frac{\partial(\rho v)}{\partial(\rho e_t)}n_y = 0 \end{aligned}$$

所以 Jacobi 矩阵的第一行为

$$\begin{bmatrix} 0 & n_x & n_y & 0 \end{bmatrix}$$

考虑 h_2 对各守恒变量的偏导数，首先考虑使用完全气体状态方程表示压强，并认为完全气体的内能是温度的单值函数，则

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial \rho} &= \frac{\partial(\rho RT)}{\partial \rho} = \frac{\partial\big(\rho(\gamma-1)e\big)}{\partial \rho} = \frac{\partial\big(\rho(\gamma-1)(e_t-e_k)\big)}{\partial \rho} = \frac{\partial\big((\gamma-1)(\rho e_t-\rho e_k)\big)}{\partial \rho} \\ &= -(\gamma-1)\frac{\partial(\rho e_k)}{\partial \rho} = -(\gamma-1)\frac{\partial\Big(\frac{(\rho u)^2+(\rho v)^2}{2\rho}\Big)}{\partial \rho} = (\gamma-1)\frac{(\rho u)^2+(\rho v)^2}{2\rho^2} = (\gamma-1)e_k \end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned} \frac{\partial h_2}{\partial \rho} &= \frac{\partial\big((\rho u u+p)n_x+\rho u v n_y\big)}{\partial \rho} = \frac{\partial\Big(\frac{(\rho u)^2}{\rho}n_x+\frac{(\rho u)(\rho v)}{\rho}n_y\Big)}{\partial \rho} + \frac{\partial p}{\partial \rho}n_x \\ &= -\frac{(\rho u)^2 n_x+(\rho u)(\rho v)n_y}{\rho^2} + (\gamma-1)e_k n_x = (\gamma-1)e_k n_x - u(un_x+vn_y) = \bar{\gamma}e_k n_x - uV_n \end{aligned}$$

按照同样的思路，有

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial(\rho u)} &= \frac{\partial(\rho RT)}{\partial(\rho u)} = \frac{\partial\big(\rho(\gamma-1)e\big)}{\partial(\rho u)} = \frac{\partial\big(\rho(\gamma-1)(e_t-e_k)\big)}{\partial(\rho u)} \\ &= (\gamma-1)\frac{\partial\Big(\rho e_t-\rho\frac{u^2+v^2}{2}\Big)}{\partial(\rho u)} = -(\gamma-1)\frac{\partial\Big(\frac{(\rho u)^2}{2\rho}\Big)}{\partial(\rho u)} = (1-\gamma)u = -\bar{\gamma}u \end{aligned}$$

现在就可以得到

$$\begin{aligned} \frac{\partial h_2}{\partial(\rho u)} &= \frac{\partial\big((\rho u u+p)n_x+\rho u v n_y\big)}{\partial(\rho u)} = \frac{\partial\Big(\frac{(\rho u)^2}{\rho}\Big)}{\partial(\rho u)}n_x + \frac{\partial\Big(\frac{(\rho u)(\rho v)}{\rho}\Big)}{\partial(\rho u)}n_y + \frac{\partial p}{\partial(\rho u)}n_x \\ &= 2un_x+vn_y-\bar{\gamma}un_x = V_n-(\bar{\gamma}-1)un_x \end{aligned}$$

同理可以得到 y 方向上的类似表达式为

$$\frac{\partial p}{\partial(\rho v)} = -\bar{\gamma}u$$

而 $\partial h_2/\partial(\rho v)$ 仿照上述推导可以得到

$$\frac{\partial h_2}{\partial(\rho v)} = \frac{\partial\Big(\frac{(\rho u)^2}{\rho}\Big)}{\partial(\rho v)}n_x + \frac{\partial\Big(\frac{(\rho u)(\rho v)}{\rho}\Big)}{\partial(\rho v)}n_y + \frac{\partial p}{\partial(\rho v)}n_x = un_y-\bar{\gamma}vn_x$$

类似的，仿照上述推导的过程，则

$$\frac{\partial p}{\partial(\rho e_t)} = \frac{\partial\big(\rho(\gamma-1)(e_t-e_k)\big)}{\partial(\rho e_t)} = \frac{\partial\big((\gamma-1)(\rho e_t-\rho e_k)\big)}{\partial(\rho e_t)} = \gamma-1 = \bar{\gamma}$$

所以有

$$\frac{\partial h_2}{\partial(\rho e_t)} = \frac{\partial\Big(\frac{(\rho u)^2}{\rho}\Big)}{\partial(\rho e_t)}n_x + \frac{\partial\Big(\frac{(\rho u)(\rho v)}{\rho}\Big)}{\partial(\rho e_t)}n_y + \frac{\partial p}{\partial(\rho e_t)}n_x = \bar{\gamma}n_x$$

综上可知 Jacobi 矩阵的第二行为

$$\begin{bmatrix} \bar{\gamma}e_k n_x - uV_n & V_n-(\bar{\gamma}-1)un_x & un_y-\bar{\gamma}vn_x & \bar{\gamma}n_x \end{bmatrix}$$

由于 h_3 与 h_2 有相似的形式，可以重复 h_2 偏导数的计算过程，这里不再赘述，直接给出 Jacobi 矩阵第三行的结果为

$$\begin{bmatrix} \bar{\gamma}e_k n_y - vV_n & vn_x-\bar{\gamma}un_y & V_n-(\bar{\gamma}-1)vn_y & \bar{\gamma}n_y \end{bmatrix}$$

在推导 $\partial h_4/\partial \rho$ 之前需要计算 $\partial(p/\rho)/\partial \rho$ ，有

$$\frac{\partial(p/\rho)}{\partial \rho} = \frac{\frac{\partial p}{\partial \rho}\rho - p}{\rho^2} = \frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial \rho} - \frac{p}{\rho^2} = \frac{\bar{\gamma}e_k}{\rho} - \frac{p}{\rho^2}$$

于是

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial h_4}{\partial \rho} &= \frac{\partial(\rho u h_t n_x + \rho v h_t n_y)}{\partial \rho} = \frac{\partial(\rho u e_t n_x + \rho v e_t n_y + \rho u \frac{p}{\rho} n_x + \rho v \frac{p}{\rho} n_y)}{\partial \rho} \\
&= \frac{\partial\left(\frac{(\rho u)(\rho e_t) n_x + (\rho v)(\rho e_t) n_y}{\rho}\right)}{\partial \rho} + \frac{\partial\left(\rho u \frac{p}{\rho} n_x + \rho v \frac{p}{\rho} n_y\right)}{\partial \rho} \\
&= -\frac{1}{\rho^2}\left((\rho u)(\rho e_t) n_x + (\rho v)(\rho e_t) n_y\right) + \rho V_n \frac{\partial(p/\rho)}{\partial \rho} \\
&= -V_n e_t + \rho V_n \left(\frac{\bar{\gamma} e_k}{\rho} - \frac{p}{\rho^2}\right) = -V_n e_t + V_n \bar{\gamma} e_k - V_n \frac{p}{\rho} = (\bar{\gamma} e_k - h_t) V_n
\end{aligned}
$$

而 $\partial h_4 / \partial(\rho u)$ 的计算则有

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial h_4}{\partial (\rho u)} &= \frac{\partial(\rho u h_t n_x + \rho v h_t n_y)}{\partial (\rho u)} = \frac{\partial(\rho u e_t n_x + \rho v e_t n_y + \rho u \frac{p}{\rho} n_x + \rho v \frac{p}{\rho} n_y)}{\partial (\rho u)} \\
&= \frac{\partial\left(\frac{(\rho u)(\rho e_t) n_x + (\rho v)(\rho e_t) n_y}{\rho}\right)}{\partial (\rho u)} + \frac{\partial\left(\rho u \frac{p}{\rho} n_x + \rho v \frac{p}{\rho} n_y\right)}{\partial (\rho u)} \\
&= e_t n_x + \frac{\partial(p/\rho)}{\partial(\rho u)}(\rho u n_x + \rho v n_y) + \frac{p}{\rho}\frac{\partial(\rho u n_x + \rho v n_y)}{\partial(\rho u)} \\
&= e_t n_x + \frac{\partial p}{\partial(\rho u)} V_n + \frac{p}{\rho} n_x = e_t n_x - \bar{\gamma} u V_n + \frac{p}{\rho} n_x = h_t n_x - \bar{\gamma} u V_n
\end{aligned}
$$

同理可以得到

$$
\frac{\partial h_4}{\partial(\rho v)} = h_t n_y - \bar{\gamma} v V_n
$$

对于 $\partial h_4 / \partial(\rho e_t)$ 则有

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial h_4}{\partial (\rho e_t)} &= \frac{\partial(\rho u h_t n_x + \rho v h_t n_y)}{\partial (\rho e_t)} = \frac{\partial(\rho u e_t n_x + \rho v e_t n_y + \rho u \frac{p}{\rho} n_x + \rho v \frac{p}{\rho} n_y)}{\partial (\rho e_t)} \\
&= \frac{\partial\left(\frac{(\rho u)(\rho e_t) n_x + (\rho v)(\rho e_t) n_y}{\rho}\right)}{\partial (\rho e_t)} + \frac{\partial\left(\rho u \frac{p}{\rho} n_x + \rho v \frac{p}{\rho} n_y\right)}{\partial (\rho e_t)} \\
&= u n_x + v n_y + \frac{\partial(p/\rho)}{\partial(\rho e_t)}(\rho u n_x + \rho v n_y) + \frac{p}{\rho}\frac{\partial(\rho u n_x + \rho v n_y)}{\partial(\rho e_t)} \\
&= V_n + \frac{\partial p}{\partial(\rho e_t)} V_n = V_n + (\gamma - 1) V_n = \gamma V_n
\end{aligned}
$$

综上可以得到 Jacobi 矩阵的第四行为

$$
\begin{bmatrix} (\bar{\gamma} e_k - h_t) V_n & h_t n_x - \bar{\gamma} u V_n & h_t n_y - \bar{\gamma} v V_n & \gamma V_n \end{bmatrix}
$$

整理以上结果，就得到了完整的通量 Jacobi 矩阵：

$$
\frac{\partial \vec{H}}{\partial \vec{W}} = \begin{bmatrix}
0 & n_x & n_y & 0 \\
\bar{\gamma} e_k n_x - u V_n & V_n - (\bar{\gamma} - 1) u n_x & u n_y - \bar{\gamma} v n_x & \bar{\gamma} n_x \\
\bar{\gamma} e_k n_y - v V_n & v n_x - \bar{\gamma} u n_y & V_n - (\bar{\gamma} - 1) v n_y & \bar{\gamma} n_y \\
(\bar{\gamma} e_k - h_t) V_n & h_t n_x - \bar{\gamma} u V_n & h_t n_y - \bar{\gamma} v V_n & \gamma V_n
\end{bmatrix}
$$

同理也可以得到在三维情况下的通量 Jacobi 矩阵：

$$
\frac{\partial \vec{H}}{\partial \vec{W}} = \begin{bmatrix}
0 & n_x & n_y & n_z & 0 \\
\bar{\gamma} e_k n_x - u V_n & V_n - (\bar{\gamma} - 1) u n_x & u n_y - \bar{\gamma} v n_x & u n_z - \bar{\gamma} w n_x & \bar{\gamma} n_x \\
\bar{\gamma} e_k n_y - v V_n & v n_x - \bar{\gamma} u n_y & V_n - (\bar{\gamma} - 1) v n_y & v n_z - \bar{\gamma} w n_y & \bar{\gamma} n_y \\
\bar{\gamma} e_k n_z - w V_n & w n_x - \bar{\gamma} u n_z & w n_y - \bar{v} n_z & V_n - (\bar{\gamma} - 1) w n_z & \bar{\gamma} n_z \\
(\bar{\gamma} e_k - h_t) V_n & h_t n_x - \bar{\gamma} u V_n & h_t n_y - \bar{\gamma} v V_n & h_t n_z - \bar{\gamma} w V_n & \gamma V_n
\end{bmatrix}
$$

6.3 LU-SGS 格式

参考Development of a coupled matrix-free LU-SGS solver for turbulent compressible flows。无矩阵下-上对称高斯-赛德尔格式 (matrix-free lower-upper symmetric Gauss-Seidel scheme) 由于其简易性和低内存要求而受到广泛应用。这里将给出 LU-SGS 格式的具体实施，并将通量 Jacobian 的计算替换为有限差分估计来实现真正的无矩阵方法。

首先，可压缩气体的行为可以用下面的质量、动量和能量守恒律来描述：

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\vec{U}) = 0 \\
&\frac{\partial(\rho\vec{U})}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\vec{U}\otimes\vec{U}) + \nabla p = \nabla\cdot\boldsymbol{\tau} \\
&\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \nabla\cdot[(\rho E+p)\vec{U}] = \nabla\cdot(\boldsymbol{\tau}\cdot\vec{U}) + \nabla\cdot(\lambda\nabla T)
\end{aligned}$$

其中 ρ 是密度，$\vec{U}$ 是速度矢量，p 是压强，$\boldsymbol{\tau}$ 是 (有效) 应力张量，E 是比总能，λ 是 (有效) 热导率，T 是温度。该守恒律方程组通过理想气体状态方程 $p=\rho RT$ 来进行封闭，R 是比气体常数。

方程左侧的空间导数表示无粘项而右侧的表示粘性项，可以用积分的形式来进行描述：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_\Omega \vec{W}\mathrm{d}V + \oint_{\partial\Omega}(\mathbf{F}-\mathbf{F}^v)\cdot\mathrm{d}\vec{S} = \vec{0}$$

其中 $\vec{W}=(\rho,\rho\vec{U},\rho E)$ 是守恒量，$\mathbf{F}$ 和 $\mathbf{F}^v$ 分别表示无粘通量和粘性通量。上述积分可以用有限体积框架进行离散，用 Ω_i 表示第 i 个网格，于是

$$|\Omega_i|\frac{\mathrm{d}\vec{W}_i}{\mathrm{d}t} = -\vec{R}(\vec{W})_i = -\sum_{j\in N_i}(\mathbf{F}_{ij}-\mathbf{F}^v_{ij})\cdot\vec{S}_{ij}$$

其中 N_i 是相邻网格的集合，$\vec{S}_{ij}=|\vec{S}_{ij}|\vec{n}$ 是由网格 i 指向网格 j 的网格面法向向量。

在稳态问题中，上述非线性常微分方程组可以使用当地拟时间步进方法求解。时间导数使用当地时间步计算的一阶向后差分来替代，有

$$|\Omega_i|\frac{\vec{W}_i^{n+1}-\vec{W}_i^n}{\Delta t_i} = -\vec{R}(\vec{W}^{n+1})_i \approx -\vec{R}(\vec{W}^n)_i - \sum_j\frac{\partial\vec{R}(\vec{W}^n)_i}{\partial\vec{W}_j}(\vec{W}_j^{n+1}-\vec{W}_j^n)$$

或者用增量 $\Delta\vec{W}^n=\vec{W}^{n+1}-\vec{W}^n$ 的形式来表述：

$$\sum_j\Big(\frac{|\Omega_i|}{\Delta t_i}\mathbf{I}+\frac{\partial\vec{R}(\vec{W}^n)_i}{\partial\vec{W}_j}\Big)\Delta\vec{W}_j^n = -\vec{R}(\vec{W}^n)_i$$

这种类型的隐式方法可以用标准线性方程求解器处理，这样处理的主要缺点是需要处理 Jacobian 矩阵 $\partial\vec{R}/\partial\vec{W}$，这会导致对内存很高的要求。因此我们使用简单的 LU-SGS，尽管它的收敛性表现不如 GMRES 或多重网格法。

首先，Jacobian 矩阵 $\partial\vec{R}/\partial\vec{W}$ 用它的低阶近似代替，通过粘性项的的薄层估计 (thin-layer approximation) 以及对流项使用 Rusanov 通量的一阶估计来进行计算：

$$\mathbf{F}_{ij}\cdot\vec{S}_{ij} \approx \frac{1}{2}\Big(\mathbf{F}(\vec{W}_i)+\mathbf{F}(\vec{W}_j)\Big)\cdot\vec{S}_{ij} - \frac{\lambda_{ij}}{2}(\vec{W}_j-\vec{W}_i)$$

其中 λ_{ij} 是 $\mathbf{F}\cdot\vec{S}$ 的 Jacobian 的谱半径，即

$$\lambda_{ij} = |\vec{U}_{ij}\cdot\vec{S}_{ij}| + a_{ij}|\vec{S}_{ij}|$$

其中 $\vec{U}_{ij}$ 是网格面上的速度，a_{ij} 是声速。由于 Rusanov 通量的简单性，低阶残差化简为

$$\vec{R}(\vec{W})_i^{LO} = \frac{1}{2}\sum_{j\in N_i}\lambda^*_{ij}\vec{W}_i + \frac{1}{2}\sum_{j\in N_i}\Big(\mathbf{F}(\vec{W}_j)\cdot\vec{S}_{ij}-\lambda^*_{ij}\vec{W}_j\Big)$$

其中 λ^* 包括对流项 Jacobian 的谱半径以及粘性项的薄层估计，即

$$\lambda^*_{ij} = \lambda_{ij} + \frac{|\vec{S}_{ij}|}{|\vec{x}_i-\vec{x}_j|}\max\Big(\frac{4}{3\rho_{ij}},\frac{\gamma}{\rho_{ij}}\Big)\Big(\frac{\mu}{\mathrm{Pr}}+\frac{\mu_T}{\mathrm{Pr}_T}\Big)$$

其中 $\vec{x}_i$ 和 $\vec{x}_j$ 是网格 i 和 j 的位置矢量，ρ_{ij} 是网格界面处的密度，γ 是比热比，μ 和 μ_T 分别是分子粘性系数和

湍流粘性系数，Pr 是 Prandtl 数，Pr_T 是湍流 Prandtl 数。最后，Jacobians 与 $\Delta\vec{W}$ 的乘积将通过有限差分来进行估计，而最终的方程组通过 LU-SGS 方法求解。

让 L 和 U 表示矩阵的下三角部分和上三角部分，即 $L_i=\{j\in N_i:j<i\}$，$U_i=\{j\in N_i:j>i\}$。于是无矩阵 LU-SGS 格式可以写成下面的两步过程：

$$D_i\Delta\vec{W}_i^*=-\vec{R}_i-\frac{1}{2}\sum_{j\in L_i}\left(\Delta\mathbf{F}_j^*\cdot\vec{S}_{ij}-\lambda_{ij}^*\Delta\vec{W}_j^*\right)$$
$$D_i\Delta\vec{W}_i=D_i\Delta\vec{W}_i^*-\frac{1}{2}\sum_{j\in U_i}\left(\Delta\mathbf{F}_j\cdot\vec{S}_{ij}-\lambda_{ij}^*\Delta\vec{W}_j\right)$$

其中

$$\Delta\vec{W}^*=\vec{W}_i^*-\vec{W}_i^n$$
$$\Delta\mathbf{F}_i^*=\mathbf{F}(\vec{W}_i^*)-\mathbf{F}(\vec{W}_i^n)$$
$$\Delta\mathbf{F}_i=\mathbf{F}(\vec{W}_i^{n+1})-\mathbf{F}(\vec{W}_i^n)$$
$$D_i=\frac{|\Omega_i|}{\Delta t_i}+\frac{1}{2}\sum_{j\in N_i}\lambda_{ij}^*$$

对于瞬态流动则需要用到双时间步技术，需要在每个物理时间步 t^n 处理下面的问题：

$$|\Omega_i|\frac{\mathrm{d}W_i}{\mathrm{d}\tau}=-\vec{R}(\vec{W})_i-|\Omega_i|\frac{\mathrm{d}W_i}{\mathrm{d}t}$$

使用当地拟时间步 τ 可以推导出拟时间步增量方程组：

$$\sum_j\left(\frac{|\Omega_i|}{\Delta\tau_i}+\frac{\partial\vec{R}(\vec{W})_i}{\partial\vec{W}_j}\right)\Delta\vec{W}_j^k=-\vec{R}(\vec{W}^k)_i-|\Omega_i|\frac{3\vec{W}_i^k-4\vec{W}_i^n+\vec{W}_i^{n-1}}{2\Delta t}$$

其中 $\Delta\vec{W}_i^k=\vec{W}_i^{k+1}-\vec{W}_i^k$，$k$ 是拟时间步的迭代索引，物理时间导数通过二阶向后差分来估计。实际上，用于稳态问题和瞬态问题的方程组在形式上非常相似。

6.4 Jacobi 迭代推进格式

参考适用于混合网格的改进雅可比迭代法及其应用。常用的 LUSGS 格式由于近似处理以及对网格排序有要求，收敛效率相对较低。这里将讨论一种高度可并行、较少近似处理的 Jacobi 迭代推进格式。

对于一个固定控制体 i，采用向后差分，Navier-Stokes 方程可以半离散为

$$\Omega_i\frac{\Delta\vec{W}_i^n}{\Delta t}=-\vec{R}_i^{n+1}=-\sum_{j\in N(i)}(\mathbf{F}_{c,ij}^{n+1}\cdot\vec{n}_{ij}-\mathbf{F}_{v,ij}^{n+1}\cdot\vec{n}_{ij})S_{ij}$$

使用第 n 时间步的残差进行线性化，可以得到

$$\vec{R}_i^{n+1}\approx\vec{R}_i^n+\left(\frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{W}}\right)_i^n\Delta\vec{W}^n$$

其中 $\partial\vec{R}/\partial\vec{W}$ 为通量雅可比矩阵，其包含了无粘通量和粘性通量对守恒变量的导数。如果采用一阶通量以及薄层近似来估计该残差的话，就有

$$\vec{R}_i=\sum_{j\in N(i)}\frac{1}{2}\left[\vec{F}(\vec{W}_i)+\vec{F}(\vec{W}_j)-(\lambda_{c,ij}+\lambda_{v,ij})(\vec{W}_j-\vec{W}_i)\right]$$

其中 $\vec{F}$ 是对流通量函数，$\lambda_{c,ij}$ 和 $\lambda_{v,ij}$ 为雅可比矩阵的谱半径，表述为

$$\lambda_{c,ij}=|\vec{U}_{ij}\cdot\vec{n}_{ij}|+a_{ij},\quad\lambda_{v,ij}=\frac{1}{|\vec{r}_{ij}|}\max\left(\frac{4}{3\rho_{ij}},\frac{\gamma}{\rho_{ij}}\right)\cdot\left(\frac{\mu_{ij}}{\mathrm{Pr}}+\frac{\mu_{t,ij}}{\mathrm{Pr}_t}\right)$$

其中 $\vec{n}_{ij}$ 为面 ij 的面法向量；$\vec{U}_{ij}$ 为速度矢量；a_{ij} 为声速；ρ_{ij} 为密度；μ_{ij} 和 $\mu_{t,ij}$ 分别为分子粘性系数和湍流粘性系数；$\vec{r}_{ij}$ 为单元 i 到单元 j 体心的距离。所以 $\vec{R}_i$ 可以被视为关于 $\vec{W}_i$ 和 $\vec{W}_j$ 的函数，即 $\vec{R}_i(\vec{W}_i,\vec{W}_j)$，那么

残差的线化表示可以进一步表达为

$$\left(\frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{W}}\right)_i^n\Delta\vec{W}^n=\left(\frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{W}_i}\right)^n\Delta\vec{W}_i^n+\sum_{j\in N(i)}\left(\frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{W}_j}\right)^n\Delta\vec{W}_j^n$$

其中残差的雅可比矩阵为

$$\frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{W}_i}=\frac{1}{2}\Big(\frac{\partial\vec{F}}{\partial\vec{W}}\Big|_{\vec{W}_i}+(\lambda_{c,ij}+\lambda_{v,ij})\mathbf{I}\Big)S_{ij},\quad \frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{W}_j}=\frac{1}{2}\Big(\frac{\partial\vec{F}}{\partial\vec{W}}\Big|_{\vec{W}_j}-(\lambda_{c,ij}+\lambda_{v,ij})\mathbf{I}\Big)S_{ij}$$

其中 $\partial\vec{F}/\partial\vec{W}$ 是对流通量雅可比矩阵。至此，控制方程可以整理为

$$\frac{\Omega_i}{\Delta t}\Delta\vec{W}_i=-\vec{R}_i-\left(\frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{W}_i}\right)^n\Delta\vec{W}_i^n-\left(\frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{W}_j}\right)^n\Delta\vec{W}_j^n$$

注意到

$$\sum_{j\in N(i)}\left(\frac{\partial\vec{F}}{\partial\vec{W}_i}\right)_{ij}S_{ij}=\mathbf{0}$$

所以控制方程可以化简为

$$\Big[\frac{\Omega_i}{\Delta t}\mathbf{I}+\sum_{j\in N(i)}\frac{1}{2}(\lambda_{c,ij}+\lambda_{v,ij})S_{ij}\mathbf{I}\Big]\Delta\vec{W}_i^n+\sum_{j\in N(i)}\frac{1}{2}\Big(\frac{\partial\vec{F}_{ij}}{\partial\vec{W}_j}-(\lambda_{c,ij}+\lambda_{v,ij})\mathbf{I}\Big)S_{ij}\Delta\vec{W}_j^n=-\vec{R}_i^n$$

由此就得到了系数矩阵中的对角矩阵部分 $\mathbf{D}_i$ 以及非对角部分 $\mathbf{O}_{ij}$：

$$\mathbf{D}_i=\frac{\Omega_i}{\Delta t}\mathbf{I}+\sum_{j\in N(i)}\frac{1}{2}(\lambda_{c,ij}+\lambda_{v,ij})S_{ij}\mathbf{I}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{O}_{ij}&=\frac{1}{2}\Big(\frac{\partial\vec{F}_{ij}}{\partial\vec{W}_j}-(\lambda_{c,ij}+\lambda_{v,ij})\mathbf{I}\Big)S_{ij}\\&=\begin{bmatrix}-\frac{1}{2}\lambda_{ij}S_{ij} & \frac{1}{2}n_xS_{ij} & \frac{1}{2}n_yS_{ij} & 0\\ \frac{1}{2}(\bar{\gamma}e_kn_x-uV_n)S_{ij} & \frac{1}{2}\big[V_n-(\bar{\gamma}-1)un_x\big]S_{ij}-\frac{1}{2}\lambda_{ij}S_{ij} & \frac{1}{2}(un_y-\bar{\gamma}vn_x)S_{ij} & \frac{1}{2}\bar{\gamma}n_xS_{ij}\\ \frac{1}{2}(\bar{\gamma}e_kn_y-vV_n)S_{ij} & \frac{1}{2}(vn_x-\bar{\gamma}un_y)S_{ij} & \frac{1}{2}\big[V_n-(\bar{\gamma}-1)vn_y\big]S_{ij}-\frac{1}{2}\lambda_{ij}S_{ij} & \frac{1}{2}\bar{\gamma}n_yS_{ij}\\ \frac{1}{2}(\bar{\gamma}e_k-h_t)V_nS_{ij} & \frac{1}{2}(h_tn_x-\bar{\gamma}uV_n)S_{ij} & \frac{1}{2}(h_tn_y-\bar{\gamma}vV_n)S_{ij} & \frac{1}{2}\gamma V_nS_{ij}-\frac{1}{2}\lambda_{ij}S_{ij}\end{bmatrix}\end{aligned}$$

现在采用 Jacobi 迭代来对上述方程组进行求解：

$$\Delta\vec{W}_i^{k+1}=\mathbf{D}_i^{-1}\Big(-\vec{R}_i^n-\sum_{j\in N(i)}\mathbf{O}_{ij}\Delta\vec{W}_j^k\Big)$$

上述迭代过程各单元互不关联，求解可以充分并行执行。

如果使用二阶通量来表示残差，则有

$$\vec{R}_i=\sum_{j\in N(i)}\frac{1}{2}\big[\vec{F}(\vec{W}_{ij}^L)+\vec{F}(\vec{W}_{ij}^R)-\lambda_{c,ij}(\vec{W}_{ij}^R-\vec{W}_{ij}^L)-\lambda_{v,ij}(\vec{W}_j-\vec{W}_i)\big]S_{ij}$$

所以 $\vec{R}_i$ 可以被视为关于 $\vec{W}_i,\vec{W}_j,\vec{W}_{ij}^L$ 和 $\vec{W}_{ij}^R$ 的函数，即 $\vec{R}_i(\vec{W}_i,\vec{W}_j,\vec{W}_{ij}^L,\vec{W}_{ij}^R)$，所以残差线化可以进一步表达为

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{W}}\right)_i^n\Delta\vec{W}^n&=\left(\frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{W}_i}\right)^n\Delta\vec{W}_i^n+\sum_{j\in N(i)}\left(\frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{W}_j}\right)^n\Delta\vec{W}_j^n+\sum_{j\in N(i)}\left(\frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{W}_{ij}^L}\right)^n\Delta\vec{W}_{ij}^L+\sum_{j\in N(i)}\left(\frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{W}_{ij}^R}\right)\Delta\vec{W}_{ij}^R\\&\approx\Big[\left(\frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{W}_i}\right)^n+\sum_{j\in N(i)}\left(\frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{W}_{ij}^L}\right)^n\Big]\Delta\vec{W}_i^n+\Big[\sum_{j\in N(i)}\left(\frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{W}_j}\right)^n+\sum_{j\in N(i)}\left(\frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{W}_{ij}^R}\right)\Big]\Delta\vec{W}_j^n\end{aligned}$$

其中残差的雅可比矩阵为

$$\frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{W}_i}=\frac{1}{2}\lambda_{v,ij}\mathbf{I}S_{ij},\quad \frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{W}_j}=-\frac{1}{2}\lambda_{v,ij}\mathbf{I}S_{ij}$$

$$\frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{W}_{ij}^L}=\frac{1}{2}\Big(\frac{\partial\vec{F}}{\partial\vec{W}}\Big|_{\vec{W}_{ij}^L}+\lambda_{c,ij}\mathbf{I}\Big)S_{ij},\quad \frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{W}_{ij}^R}=\frac{1}{2}\Big(\frac{\partial\vec{F}}{\partial\vec{W}}\Big|_{\vec{W}_{ij}^R}-\lambda_{c,ij}\mathbf{I}\Big)S_{ij}$$

其中 $\partial\vec{F}/\partial\vec{W}$ 是对流通量雅可比矩阵。至此，控制方程可以整理为

$$\frac{\Omega_i}{\Delta t}\Delta\vec{W}_i^n = -\vec{R}_i^n - \Big[\Big(\frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{W}_i}\Big)^n + \sum_{j\in N(i)}\Big(\frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{W}_{ij}^L}\Big)^n\Big]\Delta\vec{W}_i^n - \Big[\sum_{j\in N(i)}\Big(\frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{W}_j}\Big)^n + \sum_{j\in N(i)}\Big(\frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{W}_{ij}^R}\Big)\Big]\Delta\vec{W}_j^n$$

也即

$$\Big[\frac{\Omega_i}{\Delta t}\mathbf{I} + \sum_{j\in N(i)}\frac{1}{2}\Big(\frac{\partial\vec{F}}{\partial\vec{W}}\Big|_{\vec{W}_{ij}^L} + (\lambda_{c,ij}+\lambda_{v,ij})\mathbf{I}\Big)S_{ij}\Big]\Delta\vec{W}_i^n + \sum_{j\in N(i)}\frac{1}{2}\Big(\frac{\partial\vec{F}}{\partial\vec{W}}\Big|_{\vec{W}_{ij}^R} - (\lambda_{c,ij}+\lambda_{v,ij})\mathbf{I}\Big)S_{ij}\Delta\vec{W}_j^n = -\vec{R}_i^n$$

由此就得到了系数矩阵中的对角矩阵部分 $\mathbf{D}_i$ 以及非对角矩阵部分 $\mathbf{O}_{ij}$：

$$\mathbf{D}_i = \frac{\Omega_i}{\Delta t}\mathbf{I} + \sum_{j\in N(i)}\frac{1}{2}\Big(\frac{\partial\vec{F}}{\partial\vec{W}}\Big|_{\vec{W}_{ij}^L} + (\lambda_{c,ij}+\lambda_{v,ij})\mathbf{I}\Big)S_{ij}$$

$$\mathbf{O}_{ij} = \frac{1}{2}\Big(\frac{\partial\vec{F}}{\partial\vec{W}}\Big|_{\vec{W}_{ij}^R} - (\lambda_{c,ij}+\lambda_{v,ij})\mathbf{I}\Big)S_{ij}$$

第 7 章 GKS 方法

7.1 一维 GKS 方法

参考文献A Gas-Kinetic BGK Scheme for the Navier–Stokes Equations and Its Connection with Artificial Dissipation and Godunov Method。一维 BGK 方程可以写为

$$\frac{\partial f}{\partial t}+u\frac{\partial f}{\partial x}=\frac{g-f}{\tau}$$

其中 f 是气体分布函数，g 为平衡态分布函数。f 和 g 都是关于空间 x 、时间 t 、粒子速度 u 以及用于考虑多原子效应的内部变量 $\vec{\xi}$ 的函数。粒子碰撞时间 τ 与粘性系数和热传导系数有关平衡态分布函数认为是 Maxwell 分布

$$g=\rho\left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{\frac{K+3}{2}}e^{-\lambda\left((u-U)^2+v^2+w^2+|\vec{\xi}|^2\right)}$$

其中 ρ 是密度, U 是 x 方向的宏观速度, $\lambda=\frac{m}{2kT}$, 其中 m 是分子质量, k 是 Boltzmann 常数, T 是温度。K 是除了平动自由度以外的内自由度(即旋转自由度和振动自由度)。在平衡状态下, 内部变量满足 $|\vec{\xi}|^2=\xi_1^2+\xi_2^2+\cdots+\xi_K^2$ 。通过求矩可以得到宏观守恒量与分布函数的关系:

$$\vec{W}=\begin{pmatrix}\rho\\ \rho U\\ \rho E\end{pmatrix}=\int\vec{\psi}f\mathrm{d}\Xi,\quad \vec{\psi}=\begin{pmatrix}1\\ u\\ \frac{1}{2}(u^2+|\vec{\xi}|^2)\end{pmatrix}$$

其中 $\mathrm{d}\Xi=\mathrm{d}u\mathrm{d}\vec{\xi}=\mathrm{d}u\mathrm{d}\xi_1\mathrm{d}\xi_2\cdots\mathrm{d}\xi_K$ 是速度空间中的体积微元。

BGK 模型在网格界面 $x_{j+1/2}$ 和时间 t 处的解析积分解为

$$f(x_{j+1/2},t,u,\vec{\xi})=\frac{1}{\tau}\int_0^t g(x',t',u,\vec{\xi})e^{-(t-t')/\tau}\mathrm{d}t'+e^{-t/\tau}f_0(x_{j+1/2}-ut)$$

其中 $x'=x_{j+1/2}-u(t-t')$ 是粒子轨迹，f_0 是每个时间步开始时的初始气体分布函数。为了确定界面上的分布函数，必须模化两个未知量 g 和 f_0 。

根据一阶 Chapmen-Enskog 展开可以得到 $f=g-\tau\left(\frac{\partial g}{\partial t}+u\frac{\partial g}{\partial x}\right)$ ，同时考虑一阶泰勒展开，基于此可以将初始气体分布函数 f_0 假设为如下形式（下面假定网格界面为 $x=0$ ，$t=0$）:

$$f_0=\begin{cases} g^L+a^Lg^Lx-\tau(a^Lg^Lu+A^Lg^L), & x\le x_{j+1/2}\\ g^R+a^Rg^Rx-\tau(a^Rg^Ru+A^Rg^R), & x> x_{j+1/2}\end{cases}$$

其中等号右侧的前两项是平衡态的一阶泰勒展开，最后一项是由 Chapman-Enskog 展开得到的非平衡项，其表示了分布函数与 Maxwell 分布偏离的程度。

在网格界面处的平衡态 g 认为具有两个斜率，满足形式

$$g=g_0+(1-H[x])\bar{a}^Lg_0x+H[x]\bar{a}^Rg_0x+\bar{A}g_0t$$

其中 $H[x]$ 表示 Heaviside 函数，定义为

$$H[x]=\begin{cases}0, & x<0\\ 1, & x\ge 0\end{cases}$$

这里 g_0 是在 $x=0$ 处的一个当地 Maxwell 分布函数，即网格界面处的 Maxwell 分布函数。[1]

在上述对 f_0 和 g 的模化中，引入了与 Maxwell 分布在空间和时间的导数相关的参数 a^L,a^R,A^L,A^R 和

[1]注意，在这里，我们认为即使 g 在 $x=0$ 处是连续的，也依然在 $x<0$ 和 $x>0$ 两侧具有不同的斜率。

$\bar{a}^L, \bar{a}^R, \bar{A}$ 。根据 Maxwell 分布的 Taylor 展开可以得到这些参数关于粒子速度的关系：

$$a^L = a_1^L + a_2^L u + a_3^L \frac{1}{2}(u^2 + |\vec{\xi}|^2)$$

$$A^L = A_1^L + A_2^L u + A_3^L \frac{1}{2}(u^2 + |\vec{\xi}|^2)$$

$$\bar{A} = \bar{A}_1 + \bar{A}_2 u + \bar{A}_3 \frac{1}{2}(u^2 + |\vec{\xi}|^2)$$

其中 $a_1^L, a_2^L, \cdots, \bar{A}_3$ 则是当地常量。

通过重构我们可以得到网格界面两侧的宏观变量 $\vec{W}_{j+1/2}^L$ 与 $\vec{W}_{j+1/2}^R$ ，从而通过求矩可以得到关系

$$\int g^L \vec{\psi} \mathrm{d}\Xi = \vec{W}_{j+1/2}^L, \quad \int g^R \vec{\psi} \mathrm{d}\Xi = \vec{W}_{j+1/2}^R$$

$$\int g^L a^L \vec{\psi} \mathrm{d}\Xi = \frac{\vec{W}_{j+1/2}^L - \vec{W}_j}{x_{j+1/2} - x_j}, \quad \int g^R a^R \vec{\psi} \mathrm{d}\Xi = \frac{\vec{W}_{j+1} - \vec{W}_{j+1/2}^R}{x_{j+1} - x_{j+1/2}}$$

根据 Maxwell 分布的定义可知

$$g^L = \rho^L \left(\frac{\lambda^L}{\pi}\right)^{\frac{K+3}{2}} e^{-\lambda^L\left((u-U^L)^2 + |\vec{\xi}|^2\right)}, \quad g^R = \rho^R \left(\frac{\lambda^R}{\pi}\right)^{\frac{K+3}{2}} e^{-\lambda^R\left((u-U^R)^2 + |\vec{\xi}|^2\right)}$$

其中

$$\lambda^L = \frac{(K+3)\rho^L}{4\left((\rho E)^L - \frac{1}{2}\rho^L (U^L)^2\right)}, \quad \lambda^R = \frac{(K+3)\rho^R}{4\left((\rho E)^R - \frac{1}{2}\rho^R (U^R)^2\right)}$$

现在将 a^R 展开为关于粒子速度的表达式，那么 $\int g^R a^R \vec{\psi} \mathrm{d}\Xi$ 就可以写成一个矩阵乘法的形式：

$$\mathbf{M}^R \begin{pmatrix} a_1^R \\ a_2^R \\ a_3^R \end{pmatrix} = \int g^R \psi_\alpha \psi_\beta \mathrm{d}\Xi \begin{pmatrix} a_1^R \\ a_2^R \\ a_3^R \end{pmatrix}$$

这样就可以组装成一个矩阵方程组，可以据此解析地求解出 a_1^R, a_2^R, a_3^R 的具体表达式，a_1^L, a_2^L, a_3^L 也可以用类似的方法得到。

由于非平衡部分对守恒变量没有贡献，即

$$\int_{u>0} \int (a^L u + A^L) \vec{\psi} g^L \mathrm{d}\Xi = \vec{0}, \quad \int_{u<0} \int (a^R u + A^R) \vec{\psi} g^R \mathrm{d}\Xi = \vec{0}$$

基于此可以得到矩阵方程组

$$\mathbf{M}_{\alpha\beta}^L A_\beta^L = -\int g^L a^L u \psi_\alpha \mathrm{d}\Xi, \quad \mathbf{M}_{\alpha\beta}^R A_\beta^R = -\int g^R a^R u \psi_\alpha \mathrm{d}\Xi$$

因此可以解析地求解上述矩阵方程组而得到 A^L 和 A^R 的具体表达式。至此，f_0 的具体表达形式就已经完全确定了。

由于质量、动量和能量是碰撞不变量，因此 f 和 g 在任意空间、时间点都满足约束

$$\int (g - f) \vec{\psi} \mathrm{d}\Xi = \vec{0}$$

考虑在网格界面处使用该约束，并在 BGK 模型解析积分解中令 $t \to 0$ ，代入上式，可以得到

$$\int g_0 \vec{\psi} \mathrm{d}\Xi = \vec{W}_0 = \int_{u>0} \int g^L \vec{\psi} \mathrm{d}\Xi + \int_{u<0} \int g^R \vec{\psi} \mathrm{d}\Xi$$

其中 $\vec{W}_0$ 表示 $t = 0$ 时网格界面处的宏观守恒量。由于 g^L 和 g^R 的解析表达在前面已经得到了，上式也一样可以解析地计算出具体表达式。因此，网格界面处的守恒量 $\vec{W}_0$ 就得到了，进而确定出 g_0 。

然后，模化的 g 中的 $\bar{a}^L$ 与 $\bar{a}^R$ 可以由下面的关系得到：

$$\frac{\vec{W}_0 - \vec{W}_j}{x_{j+1/2} - x_j} = \mathbf{M}_{\alpha\beta}^0 \begin{pmatrix} \bar{a}_1^L \\ \bar{a}_2^L \\ \bar{a}_3^L \end{pmatrix}, \quad \frac{\vec{W}_{j+1} - \vec{W}_0}{x_{j+1} - x_{j+1/2}} = \mathbf{M}_{\alpha\beta}^0 \begin{pmatrix} \bar{a}_1^R \\ \bar{a}_2^R \\ \bar{a}_3^R \end{pmatrix}$$

其中矩阵 $\mathbf{M}_{\alpha\beta}^0 = \int g_0 \psi_\alpha \psi_\beta \mathrm{d}\Xi$ 也同样是可以解析地给出的，因此通过求解上述矩阵方程组就能够解析地得到参

数 $\bar{a}_1^L, \bar{a}_2^L, \bar{a}_3^L$ 以及 $\bar{a}_1^R, \bar{a}_2^R, \bar{a}_3^R$ 的具体表达式。

现在，我们可以确定气体分布函数 f 在网格界面处表示为

$$
\begin{aligned}
f(x_{j+1/2}, t, u, \vec{\xi}) = & (1 - e^{-t/\tau}) g_0 \\
& + \big(\tau(-1 + e^{-t/\tau}) + t e^{-t/\tau}\big)\big(\bar{a}^L H[u] + \bar{a}^R (1 - H[u])\big) u g_0 \\
& + \tau(t/\tau - 1 + e^{-t/\tau}) \bar{A} g_0 \\
& + e^{-t/\tau}\big[(1 - u(t+\tau) a^L) H[u] g^L + (1 - u(t+\tau) a^R)(1 - H[u]) g^R\big] \\
& + e^{-t/\tau}\big[-\tau A^L H[u] g^L - \tau A^R (1 - H[u]) g^R\big]
\end{aligned}
$$

上述表达式中唯一的未知量是 $\bar{A}$ 。我们利用在 Δt 时间步内网格界面处的碰撞守恒关系：

$$
\int_0^{\Delta t} \int (g - f) \vec{\psi} \mathrm{d}\Xi \mathrm{d}t = \vec{0}
$$

得到

$$
\begin{aligned}
\mathbf{M}^0_{\alpha\beta} \bar{A}_\beta \equiv & \Big(\frac{\partial \rho}{\partial t}, \frac{\partial(\rho U)}{\partial t}, \frac{\partial(\rho E)}{\partial t}\Big)^T \\
= & \int \Big[\gamma_1 g_0 + \gamma_2 u \big(\bar{a}^L H[u] + \bar{a}^R (1 - H[u])\big) g_0 + \gamma_3 \big(H[u] g^L + (1 - H[u]) g^R\big) \\
& + \gamma_4 u \big(a^L H[u] g^L + a^R (1 - H[u]) g^R\big) + \gamma_5 \big((a^L u + A^L) H[u] g^L + (a^R u + A^R)(1 - H[u]) g^R\big)\Big] \psi_\alpha \mathrm{d}\Xi
\end{aligned}
$$

其中

$$
\begin{aligned}
\gamma_0 &= \Delta t - \tau(1 - e^{-\Delta t/\tau}) \\
\gamma_1 &= -(1 - e^{-\Delta t/\tau})/\gamma_0 \\
\gamma_2 &= -1 - \gamma_4 = \big(-\Delta t + 2\tau(1 - e^{-\Delta t/\tau}) - \Delta t e^{-\Delta t/\tau}\big)/\gamma_0 \\
\gamma_3 &= -\gamma_1 = (1 - e^{-\Delta t/\tau})/\gamma_0 \\
\gamma_4 &= \big(\Delta t e^{-\Delta t/\tau} - \tau(1 - e^{-\Delta t/\tau})\big)/\gamma_0 \\
\gamma_5 &= -\tau\gamma_1 = \tau(1 - e^{-\Delta t/\tau})/\gamma_0
\end{aligned}
$$

由于上述所有矩都可以显式地计算，因此通过解析地求解上述矩阵方程组就可以得到 $\bar{A}_1, \bar{A}_2, \bar{A}_3$ 的具体表达式。至此，网格界面处的气体分布函数的表达式就完全显式地确定了下来。

最后，网格界面处关于时间的数值通量可以计算为

$$
\vec{F}_{j+1/2} = \int u \vec{\psi} f(x_{j+1/2}, t, u, \vec{\xi}) \mathrm{d}\Xi
$$

由于 $f(x_{j+1/2}, t, u, \vec{\xi})$ 已经显式地给出，也就可以解析地给出上式求矩后的具体表达式，再对时间积分即可得到当前时间步的数值通量。

7.2 二维 GKS 方法

在处理多维问题时，常采用局部坐标法来让 u 沿着界面法向，而让其他速度分量沿着界面切向。考虑网格界面 $(x_{i+1/2}, y_j)$ 在时间 t 时候的气体分布函数，其积分解形式为

$$
f(x_{i+1/2}, y_j, t, u, v, \vec{\xi}) = \frac{1}{\tau} \int_0^t g(x', y', t', u, v, \vec{\xi}) e^{-(t-t')/\tau} \mathrm{d}t' + e^{-t/\tau} f_0(x_{i+1/2} - ut, y_j - vt)
$$

其中 $x' = x_{i+1/2} - u(t - t')$ ，$y' = y_j - v(t - t')$ 为粒子运动轨迹。为了简化表示，下面将认为 $x_{i+1/2} = 0$ ，$y_j = 0$ 。

对于多尺度 GKS，初始分布函数 f_0 构建为

$$
f_0 = \begin{cases} g^L\big(1 + a^L x + b^L y - \tau(a^L u + b^L v + A^L)\big), & x \le 0 \\ g^R\big(1 + a^R x + b^R y - \tau(a^R u + b^R v + A^R)\big), & x > 0 \end{cases}
$$

其中 g^L 和 g^R 是在界面两侧重构的 Maxwell 分布函数，a^L 和 a^R 与界面法向方向的斜率有关，b^L 和 b^R 与界面切向方向的斜率有关。

在网格界面 $(x=0,y=0,t=0)$ 附近的平衡态将构建为

$$g=g_0\big(1+(1-H[x])\bar{a}^Lx+H[x]\bar{a}^Rx+\bar{b}y+\bar{A}t\big)$$

其中 $\bar{b}$ 是与切线方向的流动变量有关的项。根据气体分布函数与宏观变量的关系可以得到

$$\int g^L\vec{\psi}\mathrm{d}\Xi=\vec{W}^L_{i+1/2},\quad \int g^R\vec{\psi}\mathrm{d}\Xi=\vec{W}^R_{i+1/2}$$

$$\int g^La^L\vec{\psi}\mathrm{d}\Xi=\vec{n}\cdot\nabla\vec{W}^L=\mathbf{M}^L_{\alpha\beta}\begin{pmatrix}a^L_1\\a^L_2\\a^L_3\\a^L_4\end{pmatrix},\quad \int g^Ra^R\vec{\psi}\mathrm{d}\Xi=\vec{n}\cdot\nabla\vec{W}^R=\mathbf{M}^R_{\alpha\beta}\begin{pmatrix}a^R_1\\a^R_2\\a^R_3\\a^R_4\end{pmatrix}$$

$$\int g^Lb^L\vec{\psi}\mathrm{d}\Xi=\vec{t}\cdot\nabla\vec{W}^L=\mathbf{M}^L_{\alpha\beta}\begin{pmatrix}b^L_1\\b^L_2\\b^L_3\\b^L_4\end{pmatrix},\quad \int g^Rb^R\vec{\psi}\mathrm{d}\Xi=\vec{t}\cdot\nabla\vec{W}^R=\mathbf{M}^R_{\alpha\beta}\begin{pmatrix}b^R_1\\b^R_2\\b^R_3\\b^R_4\end{pmatrix}$$

其中 $\nabla\vec{W}^L$ 和 $\nabla\vec{W}^R$ 是网格界面两侧重构的宏观变量梯度，$\vec{n}$ 为法向单位向量，$\vec{t}$ 为切向单位向量，$\mathbf{M}_{\alpha\beta}=\int g\psi_\alpha\psi_\beta\mathrm{d}\Xi$ 。并且界面两侧的 Maxwell 分布函数为

$$g^L=\rho^L\Big(\frac{\lambda^L}{\pi}\Big)^{\frac{K+3}{2}}e^{-\lambda^L\big((u-U^L)^2+(v-V^L)^2+w^2+|\vec{\xi}|^2\big)},\quad g^R=\rho^R\Big(\frac{\lambda^R}{\pi}\Big)^{\frac{K+3}{2}}e^{-\lambda^R\big((u-U^R)^2+(v-V^R)^2+w^2+|\vec{\xi}|^2\big)}$$

通过求解上述矩阵方程组，可以由式 (7.1) 得到 a^L,b^L,a^R,b^R 的显式表达式。进而根据

$$\mathbf{M}^L_{\alpha\beta}A^L_\beta=-\int\psi_\alpha(a^Lu+b^Lv)g^L\mathrm{d}\Xi,\quad \mathbf{M}^R_{\alpha\beta}A^R_\beta=-\int\psi_\alpha(a^Ru+b^Rv)g^R\mathrm{d}\Xi$$

可以由式 (7.2)(7.3)(7.1) 求解得到 A^L 和 A^R 的显式表达式。

界面 $(x_{i+1/2},y_j,t=0)$ 处的守恒约束给出

$$\int g_0\vec{\psi}\mathrm{d}\Xi=\vec{W}_0=\int_{u>0}\int g^L\vec{\psi}\mathrm{d}\Xi+\int_{u<0}\int g^R\vec{\psi}\mathrm{d}\Xi$$

于是由式 (7.2)(7.4)(7.5)，界面处的 $\vec{W}_0$ 与 g_0 也就可以完全确定。进而有

$$\frac{\vec{W}_0-\vec{W}_i}{x_{i+1/2}-x_i}=\mathbf{M}^0_{\alpha\beta}\begin{pmatrix}\bar{a}^L_1\\\bar{a}^L_2\\\bar{a}^L_3\\\bar{a}^L_4\end{pmatrix},\quad \frac{\vec{W}_{i+1}-\vec{W}_0}{x_{i+1}-x_{i+1/2}}=\mathbf{M}^0_{\alpha\beta}\begin{pmatrix}\bar{a}^R_1\\\bar{a}^R_2\\\bar{a}^R_3\\\bar{a}^R_4\end{pmatrix}$$

其中 $\mathbf{M}^0_{\alpha\beta}=\int g_0\psi_\alpha\psi_\beta\mathrm{d}\Xi$ ，通过式 (7.1) 求解上述矩阵方程组即可得到 $\bar{a}^L_1,\bar{a}^L_2,\bar{a}^L_3,\bar{a}^L_4$ 与 $\bar{a}^R_1,\bar{a}^R_2,\bar{a}^R_3,\bar{a}^R_4$ 。参数 $\bar{b}$ 可以如下计算：

$$\int\bar{b}g_0\vec{\psi}\mathrm{d}\Xi=\int_{u>0}b^Lg^L\vec{\psi}\mathrm{d}\Xi+\int_{u<0}b^Rg^R\vec{\psi}\mathrm{d}\Xi$$

同样的，上式可以转换为矩阵方程组，从而根据式 (7.2)(7.4)(7.5)(7.1) 显式地求解出 $\bar{b}$ 的具体表达式。

将以上结果代入到网格界面的解析积分解分布函数，可以得到

$$\begin{aligned}f(x_{i+1/2},y_j,t,u,v,\vec{\xi})=&(1-e^{-t/\tau})g_0\\&+\Big(\tau(-1+e^{-t/\tau})+te^{-t/\tau}\Big)\Big(\bar{a}^LuH[u]+\bar{a}^Ru(1-H[u])+\bar{b}v\Big)g_0\\&+\tau(t/\tau-1+e^{-t/\tau})\bar{A}g_0\\&+e^{-t/\tau}\Big(\big(1-(t+\tau)(ua^L+vb^L)\big)H[u]g^L+\big(1-(t+\tau)(ua^R+vb^R)\big)(1-H[u])g^R\Big)\\&+e^{-t/\tau}\Big(-\tau A^LH[u]g^L-\tau A^R(1-H[u])g^R\Big)\end{aligned}$$

上式中唯一的未知量是 $\bar{A}$，为此我们根据

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int(g-f)\vec{\psi}\mathrm{d}\Xi\mathrm{d}t=\vec{0}$$

得到

$$\begin{aligned}\mathbf{M}^0_{\alpha\beta}\bar{A}_\beta &\equiv \left(\frac{\partial\rho}{\partial t},\frac{\partial(\rho U)}{\partial t},\frac{\partial(\rho V)}{\partial t},\frac{\partial(\rho E)}{\partial t}\right)^T\\ &= -\int\left[\left(\bar{a}^L H[u]+\bar{a}^R(1-H[u])\right)u+\bar{b}v\right]g_0\vec{\psi}\mathrm{d}\Xi\end{aligned}$$

于是根据式 (7.2)(7.3)(7.4)(7.5) 以及 (7.1) 可以得到 $\bar{A}$ 的具体表达式，至此网格界面的解析积分解分布函数的具体形式就完全确定了。

最后，在法向方向上穿过网格界面的数值通量可以计算为

$$\begin{pmatrix}F_\rho\\F_{\rho U}\\F_{\rho V}\\F_E\end{pmatrix}=\mathbf{Q}^T\int_0^{\Delta t}\int uf(x_{i+1/2},y_j,t,u,v,\vec{\xi})\begin{pmatrix}1\\u\\v\\\frac{1}{2}(u^2+v^2+|\vec{\xi}|^2)\end{pmatrix}\mathrm{d}\Xi\mathrm{d}t$$

其中 $\mathbf{Q}^T$ 是将局部坐标系下的计算结果转换回全局坐标系的转换张量。涉及到的时间积分系数有

$$\begin{aligned}\gamma_0&=\int_0^{\Delta t}1-e^{-t/\tau}\,\mathrm{d}t=\Delta t+\tau e^{\Delta t/\tau}-\tau\\ \gamma_1&=\int_0^{\Delta t}-\tau+\tau e^{-t/\tau}+te^{-t/\tau}\,\mathrm{d}t=-\tau\Delta t+2\tau^2-\tau\Delta te^{-\Delta t/\tau}-2\tau^2e^{-\Delta t/\tau}\\ \gamma_2&=\int_0^{\Delta t}t-\tau+\tau e^{-t/\tau}\,\mathrm{d}t=\frac{\Delta t^2}{2}+\tau^2-\tau\Delta t-\tau^2e^{-\Delta t/\tau}\\ \gamma_3&=\int_0^{\Delta t}e^{-t/\tau}\,\mathrm{d}t=\tau-\tau e^{-\Delta t/\tau}\\ \gamma_4&=\int_0^{\Delta t}(t+\tau)e^{-t/\tau}\,\mathrm{d}t=2\tau^2-(\tau\Delta t+2\tau^2)e^{-\Delta t/\tau}\end{aligned}$$

7.3 三维 GKS 方法

7.4 Maxwell 分布函数的矩

考虑弛豫自由度的 Maxwell 分布函数在三维流动下的形式为

$$g=\rho\left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{\frac{K+3}{2}}e^{-\lambda\left((u-U)^2+(v-V)^2+(w-W)^2+|\xi|^2\right)}$$

其中 $\vec{\xi}$ 有 K 个自由度，当 $K=0$ 时表示单原子气体，$K=2$ 时表示有两个转动自由度的双原子气体。

对于三维流动，按照完全弛豫多原子模型来计算对称的系数矩阵 $\bar{\mathbf{M}}=\int g\psi_\alpha\psi_\beta\mathrm{d}\xi$ 中的各个元素：

$$\int_{-\infty}^{+\infty}g\psi_1^2\mathrm{d}\Xi=\int_{-\infty}^{+\infty}\rho\left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{\frac{3+K}{2}}e^{-\lambda(|\vec{u}-\vec{U}|^2+|\vec{\xi}|^2)}\mathrm{d}\Xi=\rho$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}g\psi_1\psi_2\mathrm{d}\Xi=\int_{-\infty}^{+\infty}u\cdot\rho\left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{\frac{3+K}{2}}e^{-\lambda(|\vec{u}-\vec{U}|^2+|\vec{\xi}|^2)}\mathrm{d}\Xi=\rho U$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}g\psi_1\psi_3\mathrm{d}\Xi=\int_{-\infty}^{+\infty}v\cdot\rho\left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{\frac{3+K}{2}}e^{-\lambda(|\vec{u}-\vec{U}|^2+|\vec{\xi}|^2)}\mathrm{d}\Xi=\rho V$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}g\psi_1\psi_4\mathrm{d}\Xi=\int_{-\infty}^{+\infty}w\cdot\rho\left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{\frac{3+K}{2}}e^{-\lambda(|\vec{u}-\vec{U}|^2+|\vec{\xi}|^2)}\mathrm{d}\Xi=\rho W$$

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} g\psi_1\psi_5 \mathrm{d}\Xi &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2}(|\vec{u}|^2+|\vec{\xi}|^2)\cdot\rho\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{\frac{3+K}{2}} e^{-\lambda(|\vec{u}-\vec{U}|^2+|\vec{\xi}|^2)}\mathrm{d}\Xi \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2}\rho\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{\frac{3}{2}}\cdot|\vec{u}|^2 e^{-\lambda|\vec{u}-\vec{U}|^2}\mathrm{d}\vec{u} + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2}\rho\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{\frac{K}{2}}\cdot|\vec{\xi}|^2 e^{-\lambda|\vec{\xi}|^2}\mathrm{d}\vec{\xi} \\ &= \frac{1}{2}\rho|\vec{U}|^2 + \frac{K+3}{4\lambda}\rho = \rho E\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} g\psi_2^2 \mathrm{d}\Xi &= \int_{-\infty}^{+\infty} u^2\cdot\rho\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{\frac{3+K}{2}} e^{-\lambda(|\vec{u}-\vec{U}|^2+|\vec{\xi}|^2)}\mathrm{d}\Xi \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \rho\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{\frac{3+K}{2}} u^2 e^{-\lambda(u-U)^2}\cdot e^{-\lambda[(v-V)^2+(w-W)^2+|\vec{\xi}|^2]}\mathrm{d}\Xi \\ &= \rho\Big(U^2+\frac{1}{2\lambda}\Big) = \rho U^2 + \frac{\rho}{2\lambda}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} g\psi_2\psi_3 \mathrm{d}\Xi &= \int_{-\infty}^{+\infty} uv\cdot\rho\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{\frac{3+K}{2}} e^{-\lambda(|\vec{u}-\vec{U}|^2+|\vec{\xi}|^2)}\mathrm{d}\Xi \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \rho\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{\frac{3+K}{2}} \cdot u e^{-\lambda(u-U)^2}\cdot v e^{-\lambda(v-V)^2}\cdot e^{-\lambda[(w-W)^2+|\vec{\xi}|^2]}\mathrm{d}\Xi \\ &= \rho UV\end{aligned}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g\psi_2\psi_4 \mathrm{d}\Xi = \int_{-\infty}^{+\infty} uw\cdot\rho\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{\frac{3+K}{2}} e^{-\lambda(|\vec{u}-\vec{U}|^2+|\vec{\xi}|^2)}\mathrm{d}\Xi = \rho UW$$

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} g\psi_2\psi_5 \mathrm{d}\Xi &= \int_{-\infty}^{+\infty} u\frac{1}{2}(|\vec{u}|^2+|\vec{\xi}|^2)\cdot\rho\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{\frac{3+K}{2}} e^{-\lambda(|\vec{u}-\vec{U}|^2+|\vec{\xi}|^2)}\mathrm{d}\Xi \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2}\rho\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{\frac{3+K}{2}} \cdot(u^3+uv^2+uw^2+u|\vec{\xi}|^2)\cdot e^{-\lambda(|\vec{u}-\vec{U}|^2+|\vec{\xi}|^2)}\mathrm{d}\Xi \\ &= \frac{1}{2}\rho\Big[U^3+\frac{3U}{2\lambda}+U(V^2+\frac{1}{2\lambda})+U(W^2+\frac{1}{2\lambda})+U\frac{K}{2\lambda}\Big] \\ &= \frac{1}{2}\rho U|\vec{U}|^2 + \frac{K+5}{4\lambda}\rho U = \frac{\rho U}{2\lambda} + \rho UE\end{aligned}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g\psi_3^2 \mathrm{d}\Xi = \int_{-\infty}^{+\infty} v^2\cdot\rho\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{\frac{3+K}{2}} e^{-\lambda(|\vec{u}-\vec{U}|^2+|\vec{\xi}|^2)}\mathrm{d}\Xi = \rho V^2 + \frac{\rho}{2\lambda}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g\psi_3\psi_4 \mathrm{d}\Xi = \int_{-\infty}^{+\infty} vw\cdot\rho\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{\frac{3+K}{2}} e^{-\lambda(|\vec{u}-\vec{U}|^2+|\vec{\xi}|^2)}\mathrm{d}\Xi = \rho VW$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g\psi_3\psi_5 \mathrm{d}\Xi = \int_{-\infty}^{+\infty} v\frac{1}{2}(|\vec{u}|^2+|\vec{\xi}|^2)\cdot\rho\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{\frac{3+K}{2}} e^{-\lambda(|\vec{u}-\vec{U}|^2+|\vec{\xi}|^2)}\mathrm{d}\Xi = \frac{\rho V}{2\lambda} + \rho VE$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g\psi_4^2 \mathrm{d}\Xi = \int_{-\infty}^{+\infty} w^2\cdot\rho\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{\frac{3+K}{2}} e^{-\lambda(|\vec{u}-\vec{U}|^2+|\vec{\xi}|^2)}\mathrm{d}\Xi = \rho W^2 + \frac{\rho}{2\lambda}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g\psi_4\psi_5 \mathrm{d}\Xi = \int_{-\infty}^{+\infty} w\frac{1}{2}(|\vec{u}|^2+|\vec{\xi}|^2)\cdot\rho\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{\frac{3+K}{2}} e^{-\lambda(|\vec{u}-\vec{U}|^2+|\vec{\xi}|^2)}\mathrm{d}\Xi = \frac{\rho W}{2\lambda} + \rho WE$$

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} g\psi_5^2 \mathrm{d}\Xi &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{4}(|\vec{u}|^2+|\vec{\xi}|^2)^2 \cdot \rho\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{\frac{3+K}{2}} e^{-\lambda(|\vec{u}-\vec{U}|^2+|\vec{\xi}|^2)}\mathrm{d}\Xi \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{4}\rho\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{\frac{3+K}{2}} \cdot [|\vec{u}|^4 + 2|\vec{u}|^2|\vec{\xi}|^2 + K\xi^4 + K(K-1)\xi^2\eta^2] e^{-\lambda(|\vec{u}-\vec{U}|^2+|\vec{\xi}|^2)}\mathrm{d}\Xi \\
&= \frac{1}{4}\rho\Big[U^4 + \frac{3}{4\lambda^2} + \frac{3U^2}{\lambda} + V^4 + \frac{3}{4\lambda^2} + \frac{3V^2}{\lambda} + W^4 + \frac{3}{4\lambda^2} + \frac{3W^2}{\lambda} \\
&\quad 2(U^2+\frac{1}{2\lambda})(V^2+\frac{1}{2\lambda}) + 2(U^2+\frac{1}{2\lambda})(W^2+\frac{1}{2\lambda}) + 2(V^2+\frac{1}{2\lambda})(W^2+\frac{1}{2\lambda}) \\
&\quad 2(U^2+\frac{1}{2\lambda})\frac{K}{2\lambda} + 2(V^2+\frac{1}{2\lambda})\frac{K}{2\lambda} + 2(W^2+\frac{1}{2\lambda})\frac{K}{2\lambda} + K\frac{3}{4\lambda^2} + K(K-1)\frac{1}{4\lambda^2}\Big] \\
&= \frac{1}{4}\rho(U^2+V^2+W^2)^2 + \frac{K+5}{4\lambda}\rho(U^2+V^2+W^2) + \frac{(K+5)(K+3)}{16\lambda^2}\rho \\
&= \rho E^2 + \frac{\rho E}{2\lambda} + \frac{\rho}{4\lambda}|\vec{U}|^2
\end{aligned}
$$

也即系数矩阵为

$$
\mathbf{M} = \begin{pmatrix}
\rho & \rho U & \rho V & \rho W & \rho E \\
\rho U & \rho U^2 + \frac{\rho}{2\lambda} & \rho UV & \rho UW & \frac{\rho U}{2\lambda} + \rho UE \\
\rho V & \rho UV & \rho V^2 + \frac{\rho}{2\lambda} & \rho VW & \frac{\rho V}{2\lambda} + \rho VE \\
\rho W & \rho UW & \rho VW & \rho W^2 + \frac{\rho}{2\lambda} & \frac{\rho W}{2\lambda} + \rho WE \\
\rho E & \frac{\rho U}{2\lambda} + \rho UE & \frac{\rho V}{2\lambda} + \rho VE & \frac{\rho W}{2\lambda} + \rho WE & \rho E^2 + \frac{\rho E}{2\lambda} + \frac{\rho}{4\lambda}|\vec{U}|^2
\end{pmatrix}
$$

因此，在处理如下的矩阵方程时：

$$
\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \\ b_5 \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_5 \end{pmatrix}
$$

可以解得

$$
\begin{aligned}
a_5 &= \frac{b_5 + (|\vec{U}|^2 - E)b_1 - \vec{U}\cdot\vec{b}_{24}}{\frac{\rho}{2\lambda}(E - \frac{1}{2}|\vec{U}|^2)} \\
\vec{a}_{24} &= \frac{2\lambda}{\rho}(\vec{b}_{24} - b_1\vec{U}) - a_5\vec{U} \\
a_1 &= \frac{b_1}{\rho} - \vec{U}\cdot\vec{a}_{24} - Ea_5
\end{aligned} \tag{7.1}
$$

除了系数矩阵之外，在 GKS 方法中还需要反复计算界面处的各种矩，涉及到 Maxwell 分布函数的有界积分和无界积分。这里我们将给出求解这些矩的公式。首先引入下面的求矩算符标示：

$$
\langle \cdots \rangle = \frac{1}{\rho}\int (\cdots) g \,\mathrm{d}u\mathrm{d}v\mathrm{d}w\mathrm{d}\vec{\xi}
$$

其中 $\mathrm{d}\vec{\xi} = \mathrm{d}\xi_1\mathrm{d}\xi_2\cdots\mathrm{d}\xi_K$ ，那么一般的求矩公式变成

$$
\langle u^n v^m w^k \xi^l \rangle = \langle u^n\rangle\langle v^m\rangle\langle w^k\rangle\langle \xi^l\rangle
$$

其中 n, w, k 是整数，l 是一个偶数 (因为 ξ 自由度的对称特性)。

矩 $\langle \xi^l \rangle$ 的积分限总是无界的，结果为

$$
\langle \xi^0 \rangle = 1, \quad \langle \xi^2 \rangle = \frac{K}{2\lambda}, \quad \langle \xi^4 \rangle = \frac{3K}{4\lambda^2} + \frac{K(K-1)}{4\lambda^2}, \quad \langle \xi^{2l} \rangle = \frac{K+2(l-1)}{2\lambda}\langle \xi^{2(l-1)} \rangle \tag{7.2}
$$

而对于分子速度分量的矩 $\langle u^n \rangle$ ，如果积分限是无界的，那么

$$
\langle u^0 \rangle = 1, \quad \langle u \rangle = U, \quad \langle u^{n+2} \rangle = U\langle u^{n+1}\rangle + \frac{n+1}{2\lambda}\langle u^n \rangle \tag{7.3}
$$

而如果积分限是从 0 到 $+\infty$ 则会涉及到误差函数，结果为

$$\langle u^0\rangle_{>0}=\frac{1}{2}\operatorname{erfc}(-\sqrt{\lambda}U),\quad \langle u\rangle_{>0}=U\langle u^0\rangle_{>0}+\frac{1}{2}\frac{e^{-\lambda U^2}}{\sqrt{\pi\lambda}},\quad \langle u^{n+2}\rangle_{>0}=U\langle u^{n+1}\rangle_{>0}+\frac{n+1}{2\lambda}\langle u^n\rangle_{>0} \tag{7.4}$$

而如果积分限是从 $-\infty$ 到 0 则结果为

$$\langle u^0\rangle_{<0}=\frac{1}{2}\operatorname{erfc}(\sqrt{\lambda}U),\quad \langle u\rangle_{<0}=U\langle u^0\rangle_{<0}-\frac{1}{2}\frac{e^{-\lambda U^2}}{\sqrt{\pi\lambda}},\quad \langle u^{n+2}\rangle_{<0}=U\langle u^{n+1}\rangle_{<0}+\frac{n+1}{2\lambda}\langle u^n\rangle_{<0} \tag{7.5}$$

当然，对于 $\langle v^m\rangle$ 和 $\langle w^k\rangle$ 的形式也是类似的。

首先是高斯积分，有

$$I_0=\int_a^b e^{-\lambda x^2}\mathrm{d}x,\qquad I_1=\int_a^b xe^{-\lambda x^2}\mathrm{d}x=\frac{1}{-2\lambda}e^{-\lambda x^2}\Big|_a^b$$

$$I_k=\int_a^b x^k e^{-\lambda x^2}\mathrm{d}x=\frac{1}{-2\lambda}\Big(x^{k-1}e^{-\lambda x^2}\Big|_a^b-(k-1)\int_a^b x^{k-2}e^{-\lambda x^2}\mathrm{d}x\Big)=\frac{1}{-2\lambda}\Big(x^{k-1}e^{-\lambda x^2}\Big|_a^b-(k-1)I_{k-2}\Big)$$

具体而言，会用到以下结果：

$$\begin{aligned}
I_0^+&=\int_{-U}^{+\infty}e^{-\lambda x^2}\mathrm{d}x=\frac{1}{\sqrt{\lambda}}\cdot\frac{\sqrt{\pi}}{2}\operatorname{erfc}(-\sqrt{\lambda}U)\\
I_1^+&=\int_{-U}^{+\infty}xe^{-\lambda x^2}\mathrm{d}x=\frac{1}{2\lambda}e^{-\lambda U^2}\\
I_k^+&=\int_{-U}^{+\infty}x^k e^{-\lambda x^2}\mathrm{d}x=\frac{1}{2\lambda}\Big((-U)^{k-1}e^{-\lambda U^2}+(k-1)I_{k-2}^+\Big)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_0^-&=\int_{-\infty}^{-U}e^{-\lambda x^2}\mathrm{d}x=\frac{1}{\sqrt{\lambda}}\frac{\sqrt{\pi}}{2}\operatorname{erfc}(\sqrt{\lambda}U)\\
I_1^-&=\int_{-\infty}^{-U}xe^{-\lambda x^2}\mathrm{d}x=\frac{1}{-2\lambda}e^{-\lambda U^2}\\
I_k^-&=\int_{-\infty}^{-U}x^k e^{-\lambda x^2}\mathrm{d}x=\frac{1}{2\lambda}\Big(-(-U)^{k-1}e^{-\lambda U^2}+(k-1)I_{k-2}^-\Big)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_0^\infty&=\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\lambda x^2}\mathrm{d}x=\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\lambda}}\\
I_1^\infty&=\int_{-\infty}^{+\infty}xe^{-\lambda x^2}\mathrm{d}x=0\\
I_k^\infty&=\int_{-\infty}^{+\infty}x^k e^{-\lambda x^2}\mathrm{d}x=\frac{k-1}{2\lambda}I_{k-2}^\infty
\end{aligned}$$

基于高斯积分可以计算各种矩

$$\begin{aligned}
M_0^+&=\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{1/2}\int_0^{+\infty}e^{-\lambda(u-U)^2}\mathrm{d}u=\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{1/2}I_0^+\\
M_1^+&=\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{1/2}\int_0^{+\infty}ue^{-\lambda(u-U)^2}\mathrm{d}u=\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{1/2}I_1^++UM_0^+\\
M_2^+&=\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{1/2}\int_0^{+\infty}u^2e^{-\lambda(u-U)^2}\mathrm{d}u=\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{1/2}I_2^++2UM_1^+-U^2M_0^+\\
M_3^+&=\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{1/2}\int_0^{+\infty}u^3e^{-\lambda(u-U)^2}\mathrm{d}u=\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{1/2}I_3^++3UM_2^+-3U^2M_1^++U^3M_0^+\\
M_4^+&=\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{1/2}\int_0^{+\infty}u^4e^{-\lambda(u-U)^2}\mathrm{d}u=\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{1/2}I_4^++4UM_3^+-6U^2M_2^++4U^3M_1^+-U^4M_0^+
\end{aligned}$$

类似的有

$$
\begin{aligned}
M_0^- &= \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{0} e^{-\lambda(u-U)^2}\mathrm{d}u = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/2} I_0^- \\
M_1^- &= \int_{-\infty}^{0} ue^{-\lambda(u-U)^2}\mathrm{d}u = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/2} I_1^- + UM_0^- \\
M_2^- &= \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{0} u^2e^{-\lambda(u-U)^2}\mathrm{d}u = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/2} I_2^- + 2UM_1^- - U^2M_0^- \\
M_3^- &= \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{0} u^3e^{-\lambda(u-U)^2}\mathrm{d}u = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/2} I_3^- + 3UM_2^- - 3U^2M_1^- + U^3M_0^- \\
M_4^- &= \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{0} u^4e^{-\lambda(u-U)^2}\mathrm{d}u = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/2} I_4^- + 4UM_3^- - 6U^2M_2^- + 4U^3M_1^- - U^4M_0^-
\end{aligned}
$$

以及

$$
\begin{aligned}
M_0^\infty &= \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda(u-U)^2}\mathrm{d}u = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/2} I_0^\infty = 1 \\
M_1^\infty &= \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty} ue^{-\lambda(u-U)^2}\mathrm{d}u = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/2} I_1^\infty + UM_0^\infty = U \\
M_2^\infty &= \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty} u^2e^{-\lambda(u-U)^2}\mathrm{d}u = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/2} I_2^\infty + 2UM_1^\infty - U^2M_0^\infty = U^2 + \frac{1}{2\lambda} \\
M_3^\infty &= \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty} u^3e^{-\lambda(u-U)^2}\mathrm{d}u = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/2} I_3^\infty + 3UM_2^\infty - 3U^2M_1^\infty + U^3M_0^\infty \\
M_4^\infty &= \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty} u^4e^{-\lambda(u-U)^2}\mathrm{d}u = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/2} I_4^\infty + 4UM_3^\infty - 6U^2M_2^\infty + 4U^3M_1^\infty - U^4M_0^\infty
\end{aligned}
$$

经过整理后可以发现上述结果可以写成递推形式：

$$
\begin{aligned}
&M_0^+ = \frac{1}{2}\,\mathrm{erfc}(-\sqrt{\lambda}U), \qquad M_1^+ = UM_0^+ + \frac{1}{2\sqrt{\pi}\sqrt{\lambda}}e^{-\lambda U^2} \\
&M_k^+ = UM_{k-1}^+ + \frac{k-1}{2\lambda}M_{k-2}^+ \quad (k \ge 2) \\
&M_0^- = \frac{1}{2}\,\mathrm{erfc}(\sqrt{\lambda}U), \qquad M_1^- = UM_0^- - \frac{1}{2\sqrt{\pi}\sqrt{\lambda}}e^{-\lambda U^2} \\
&M_k^- = UM_{k-1}^- + \frac{k-1}{2\lambda}M_{k-2}^- \quad (k \ge 2)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&M_0^\infty = 1, \qquad M_1^\infty = U \\
&M_k^\infty = UM_{k-1}^\infty + \frac{k-1}{2\lambda}M_{k-2}^\infty \quad (k \ge 2)
\end{aligned}
$$

可以看到，除了 $M_0^\infty = 1$ 是固定值外，其他矩都与相应的宏观量有关。

特别的，有必要指出针对全弛豫多原子模型下对内自由度的求矩结果：

$$
\begin{aligned}
&\left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{K/2}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda|\vec{\xi}|^2}\mathrm{d}\vec{\xi} = 1 = M_0^\infty \\
&\left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{K/2}\int_{-\infty}^{+\infty} |\vec{\xi}|^2e^{-\lambda|\vec{\xi}|^2}\mathrm{d}\vec{\xi} = \frac{K}{2\lambda} = KM_2^\infty(0) \\
&\left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{K/2}\int_{-\infty}^{+\infty} |\vec{\xi}|^4e^{-\lambda|\vec{\xi}|^2}\mathrm{d}\vec{\xi} = \frac{3K}{4\lambda^2} + \frac{K(K-1)}{4\lambda^2} = \left(K + \frac{1}{3}K(K-1)\right)M_4^\infty(0) = \frac{K^2+2K}{3}M_4^\infty(0)
\end{aligned}
$$

为了计算出 A^L 和 A^R 的显式表达式，需要计算如下的矩：

$$\begin{aligned}\int (au+bv+cw)g\vec{\psi}\mathrm{d}\Xi = \int \Big(&a_1u + a_2u^2 + a_3uv + a_4uw + a_5\frac{1}{2}(u^3+uv^2+uw^2+u|\vec{\xi}|^2)\\ &+ b_1v + b_2uv + b_3v^2 + b_4vw + b_5\frac{1}{2}(u^2v+v^3+vw^2+v|\vec{\xi}|^2)\\ &+ c_1w + c_2uw + c_3vw + c_4w^2 + c_5\frac{1}{2}(u^2w+v^2w+w^3+w|\vec{\xi}|^2)\Big)g\vec{\psi}\mathrm{d}\Xi\end{aligned}$$

于是

$$\begin{aligned}&\int (au+bv+cw)g\psi_1\mathrm{d}\Xi\\ &= \rho\Big[a_2M_2^\infty(U) + \big[a_1 + a_3M_1^\infty(V) + a_4M_1^\infty(W)\big]M_1^\infty(U) + \frac{a_5}{2}\Big(M_3^\infty(U) + \big[M_2^\infty(V)+M_2^\infty(W)+KM_2^\infty(0)\big]M_1^\infty(U)\Big)\\ &\quad + b_3M_2^\infty(V) + \big[b_1 + b_2M_1^\infty(U) + b_4M_1^\infty(W)\big]M_1^\infty(V) + \frac{b_5}{2}\Big(M_3^\infty(V) + \big[M_2^\infty(U)+M_2^\infty(W)+KM_2^\infty(0)\big]M_1^\infty(V)\Big)\\ &\quad + c_4M_2^\infty(W) + \big[c_1 + c_2M_1^\infty(U) + c_3M_1^\infty(V)\big]M_1^\infty(W) + \frac{c_5}{2}\Big(M_3^\infty(W) + \big[M_2^\infty(U)+M_2^\infty(V)+KM_2^\infty(0)\big]M_1^\infty(W)\Big)\Big]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}&\int (au+bv+cw)g\psi_2\mathrm{d}\Xi\\ &= \rho\Big[a_2M_3^\infty(U) + \big[a_1 + a_3M_1^\infty(V) + a_4M_1^\infty(W)\big]M_2^\infty(U) + \frac{a_5}{2}\Big(M_4^\infty(U) + \big[M_2^\infty(V)+M_2^\infty(W)+KM_2^\infty(0)\big]M_2^\infty(U)\Big)\\ &\quad + b_3M_1^\infty(U)M_2^\infty(V) + \big[b_1M_1^\infty(U) + b_2M_2^\infty(U) + b_4M_1^\infty(U)M_1^\infty(W)\big]M_1^\infty(V)\\ &\quad + \frac{b_5}{2}\Big(M_1^\infty(U)M_3^\infty(V) + \big[M_3^\infty(U)+M_1^\infty(U)M_2^\infty(W)+KM_1^\infty(U)M_2^\infty(0)\big]M_1^\infty(V)\Big)\\ &\quad + c_4M_1^\infty(U)M_2^\infty(W) + \big[c_1M_1^\infty(U) + c_2M_2^\infty(U) + c_3M_1^\infty(U)M_1^\infty(V)\big]M_1^\infty(W)\\ &\quad + \frac{c_5}{2}\Big(M_1^\infty(U)M_3^\infty(W) + \big[M_3^\infty(U)+M_1^\infty(U)M_2^\infty(V)+KM_1^\infty(U)M_2^\infty(0)\big]M_1^\infty(W)\Big)\Big]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}&\int (au+bv+cw)g\psi_3\mathrm{d}\Xi\\ &= \rho\Big[a_2M_2^\infty(U)M_1^\infty(V) + \big[a_1M_1^\infty(V) + a_3M_2^\infty(V) + a_4M_1^\infty(V)M_1^\infty(W)\big]M_1^\infty(U)\\ &\quad + \frac{a_5}{2}\Big(M_3^\infty(U)M_1^\infty(V) + \big[M_3^\infty(V)+M_1^\infty(V)M_2^\infty(W)+KM_1^\infty(V)M_2^\infty(0)\big]M_1^\infty(U)\Big)\\ &\quad + b_3M_3^\infty(V) + \big[b_1 + b_2M_1^\infty(U) + b_4M_1^\infty(W)\big]M_2^\infty(V) + \frac{b_5}{2}\Big(M_4^\infty(V) + \big[M_2^\infty(U)+M_2^\infty(W)+KM_2^\infty(0)\big]M_2^\infty(V)\Big)\\ &\quad + c_4M_1^\infty(V)M_2^\infty(W) + \big[c_1M_1^\infty(V) + c_2M_1^\infty(U)M_1^\infty(V) + c_3M_2^\infty(V)\big]M_1^\infty(W)\\ &\quad + \frac{c_5}{2}\Big(M_1^\infty(V)M_3^\infty(W) + \big[M_2^\infty(U)M_1^\infty(V)+M_3^\infty(V)+KM_1^\infty(V)M_2^\infty(0)\big]M_1^\infty(W)\Big)\Big]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}&\int (au+bv+cw)g\psi_4\mathrm{d}\Xi\\ &= \rho\Big[a_2M_2^\infty(U)M_1^\infty(W) + \big[a_1M_1^\infty(W) + a_3M_1^\infty(V)M_1^\infty(W) + a_4M_2^\infty(W)\big]M_1^\infty(U)\\ &\quad + \frac{a_5}{2}\Big(M_3^\infty(U)M_1^\infty(W) + \big[M_2^\infty(V)M_1^\infty(W)+M_3^\infty(W)+KM_1^\infty(W)M_2^\infty(0)\big]M_1^\infty(U)\Big)\\ &\quad + b_3M_2^\infty(V)M_1^\infty(W) + \big[b_1M_1^\infty(W) + b_2M_1^\infty(U)M_1^\infty(W) + b_4M_2^\infty(W)\big]M_1^\infty(V)\\ &\quad + \frac{b_5}{2}\Big(M_3^\infty(V)M_1^\infty(W) + \big[M_2^\infty(U)M_1^\infty(W)+M_3^\infty(W)+KM_1^\infty(W)M_2^\infty(0)\big]M_1^\infty(V)\Big)\\ &\quad + c_4M_3^\infty(W) + \big[c_1 + c_2M_1^\infty(U) + c_3M_1^\infty(V)\big]M_2^\infty(W) + \frac{c_5}{2}\Big(M_4^\infty(W) + \big[M_2^\infty(U)+M_2^\infty(V)+KM_2^\infty(0)\big]M_2^\infty(W)\Big)\Big]\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&\int (au+bv+cw)g\psi_5 \mathrm{d}\Xi \\
&= \frac{\rho}{2}\Big[a_2 M_4^\infty(U) + \big[a_1 + a_3 M_1^\infty(V) + a_4 M_1^\infty(W)\big] M_3^\infty(U) + \frac{a_5}{2}\Big(M_5^\infty(U) + \big[M_2^\infty(V) + M_2^\infty(W) + K M_2^\infty(0)\big] M_3^\infty(U)\Big) \\
&\quad + b_3 M_2^\infty(U) M_2^\infty(V) + \big[b_1 M_2^\infty(U) + b_2 M_3^\infty(U) + b_4 M_2^\infty(U) M_1^\infty(W)\big] M_1^\infty(V) \\
&\quad + \frac{b_5}{2}\Big(M_2^\infty(U) M_3^\infty(V) + \big[M_4^\infty(U) + M_2^\infty(U) M_2^\infty(W) + K M_2^\infty(U) M_2^\infty(0)\big] M_1^\infty(V)\Big) \\
&\quad + c_4 M_2^\infty(U) M_2^\infty(W) + \big[c_1 M_2^\infty(U) + c_2 M_3^\infty(U) + c_3 M_2^\infty(U) M_1^\infty(V)\big] M_1^\infty(W) \\
&\quad + \frac{c_5}{2}\Big(M_2^\infty(U) M_3^\infty(W) + \big[M_4^\infty(U) + M_2^\infty(U) M_2^\infty(V) + K M_2^\infty(U) M_2^\infty(0)\big] M_1^\infty(W)\Big) \\
&\quad + a_2 M_2^\infty(U) M_2^\infty(V) + \big[a_1 M_2^\infty(V) + a_3 M_3^\infty(V) + a_4 M_2^\infty(V) M_1^\infty(W)\big] M_1^\infty(U) \\
&\quad + \frac{a_5}{2}\Big(M_3^\infty(U) M_2^\infty(V) + \big[M_4^\infty(V) + M_2^\infty(V) M_2^\infty(W) + K M_2^\infty(V) M_2^\infty(0)\big] M_1^\infty(U)\Big) \\
&\quad + b_3 M_4^\infty(V) + \big[b_1 + b_2 M_1^\infty(U) + b_4 M_1^\infty(W)\big] M_3^\infty(V) + \frac{b_5}{2}\Big(M_5^\infty(V) + \big[M_2^\infty(U) + M_2^\infty(W) + K M_2^\infty(0)\big] M_3^\infty(V)\Big) \\
&\quad + c_4 M_2^\infty(V) M_2^\infty(W) + \big[c_1 M_2^\infty(V) + c_2 M_1^\infty(U) M_2^\infty(V) + c_3 M_3^\infty(V)\big] M_1^\infty(W) \\
&\quad + \frac{c_5}{2}\Big(M_2^\infty(V) M_3^\infty(W) + \big[M_2^\infty(U) M_2^\infty(V) + M_4^\infty(V) + K M_2^\infty(V) M_2^\infty(0)\big] M_1^\infty(W)\Big) \\
&\quad + a_2 M_2^\infty(U) M_2^\infty(W) + \big[a_1 M_2^\infty(W) + a_3 M_1^\infty(V) M_2^\infty(W) + a_4 M_3^\infty(W)\big] M_1^\infty(U) \\
&\quad + \frac{a_5}{2}\Big(M_3^\infty(U) M_2^\infty(W) + \big[M_2^\infty(V) M_2^\infty(W) + M_4^\infty(W) + K M_2^\infty(W) M_2^\infty(0)\big] M_1^\infty(U)\Big) \\
&\quad + b_3 M_2^\infty(V) M_2^\infty(W) + \big[b_1 M_2^\infty(W) + b_2 M_1^\infty(U) M_2^\infty(W) + b_4 M_3^\infty(W)\big] M_1^\infty(V) \\
&\quad + \frac{b_5}{2}\Big(M_3^\infty(V) M_2^\infty(W) + \big[M_2^\infty(U) M_2^\infty(W) + M_4^\infty(W) + K M_2^\infty(W) M_2^\infty(0)\big] M_1^\infty(V)\Big) \\
&\quad + c_4 M_4^\infty(W) + \big[c_1 + c_2 M_1^\infty(U) + c_3 M_1^\infty(V)\big] M_3^\infty(W) + \frac{c_5}{2}\Big(M_5^\infty(W) + \big[M_2^\infty(U) + M_2^\infty(V) + K M_2^\infty(0)\big] M_3^\infty(W)\Big) \\
&\quad + \Big]
\end{aligned}
$$

7.5 GKS 的 Prandtl 数修正

前面给出的网格界面数值通量是基于 BGK 模型的积分解，因此在连续流极限下会得到单位 Prandtl 数。为了能够模拟任意的 Prandtl 数，能量通量中的热量输运部分需要根据给定的 Prandtl 数进行修正。由于已经得到了网格界面处气体分布函数 f 的显式表达，因此可以准确地计算关于时间的热通量 (其中 u 沿界面法向，v 和 w 沿界面切向)：

$$
q = \frac{1}{2}\int (u-U)\big((u-U)^2 + (v-V)^2 + w^2 + |\vec{\xi}|^2\big) f \mathrm{d}\Xi
$$

其中界面平均速度为

$$
U = \frac{\int u f \mathrm{d}\Xi}{\int f \mathrm{d}\Xi}, \quad V = \frac{\int v f \mathrm{d}\Xi}{\int f \mathrm{d}\Xi}
$$

然后，GKS 中的 Prandtl 数就可以通过修改能量通量输运中的热流来实现修正：

$$
F_E^{new} = F_E + \Big(\frac{1}{\mathrm{Pr}} - 1\Big) q
$$

其中 F_E 是修正前的能量通量。对于没有更新气体分布函数的连续流计算，这样的修正方式已经足够得到精确的 NS 解。

7.6 GKS 的碰撞时间

对于足够解析地耗散区域，比如网格大小 Δx 要比物理粘性决定的耗散层的尺度更小时，原始的重构理论上能够给出网格界面处连续的流动分布。在这种情况下碰撞时间可以自然地定义为

$$\tau_p = \frac{\mu(\vec{W}_0)}{p(\vec{W}_0)}$$

其中 μ 为动力粘度系数，p 是压强。这是 BGK 模型的 Chapman-Enskog 展开的结果。动力粘性系数可以取更加现实的值，比如令其满足 Sutherland's law。

理论上，耗散结构，比如激波厚度，是仅由物理粘性决定的，该结构应该与网格大小与时间步无关。但是，如果网格大小不足以解析波结构，物理解实际上要被替换为数值解，物理激波厚度将被替换为数值网格的大小。在这种情况下，讨论原始 NS 方程在这个区域的解是没有意义的。如果我们想要避免隐式的人工耗散，就最好承认在这种情况下，原始粘性对应的 NS 解并不能很好地保持。也就是说，我们需要引入一个有效粘性来将激波厚度增大到数值网格的尺度。因此，除了间断初始重构外，还需要让碰撞时间考虑物理与数值上的效应。在欠解析地间断区域，需要一个额外的数值耗散。由于网格界面的跳跃的大小可以反应一个流动结构的欠解析，GKS 的碰撞时间将对此进行考虑，并定义了一个与压强跳跃有关的广义碰撞时间：

$$\tau_n = \frac{\mu(\vec{W}_0)}{p(\vec{W}_0)} + \alpha_n \frac{|\rho_L/\lambda_L - \rho_R/\lambda_R|}{|\rho_L/\lambda_L + \rho_R/\lambda_R|}\Delta t$$

其中 Δt 是 CFL 时间步，它通过 CFL 条件与网格大小建立关系。上式的第二部分对应于数值粘性，参数 α_n 可以取从 1 到 5 的值。在光滑流动区域或在滑移线附近，额外的碰撞时间会非常小或者消失，因为此时压强分布是连续的。数值试验表明，上述修正在边界层被足够解析的情况下并不会毁坏边界层计算，而且能够提高 GKS 在激波捕捉中的鲁棒性。

为了更进一步地区分流体力学尺度的效应以及动理学尺度的效应，物理碰撞时间 τ_p 和数值碰撞时间 τ_n 在网格界面的气体分布函数中都会考虑：

$$\begin{aligned}
f(x_{i+1/2}, y_j, t, u, v, \vec{\xi}) = (1 - e^{-t/\tau_n})g_0& \\
&+ \Big(\tau_p(-1 + e^{-t/\tau_n}) + te^{-t/\tau_n}\Big)\Big(\bar{a}^L H[u] + \bar{a}^R(1 - H[u]) + \bar{b}v\Big)ug_0 \\
&+ \tau_p(t/\tau_p - 1 + e^{-t/\tau_n})\bar{A}g_0 \\
&+ e^{-t/\tau_n}\Big(\big(1 - (t + \tau_p)(ua^L + vb^L)\big)H[u]g^L + \big(1 - (t + \tau_p)(ua^R + vb^R)\big)(1 - H[u])g^R\Big) \\
&+ e^{-t/\tau_n}\Big(-\tau_p A^L H[u]g^L - \tau_p A^R(1 - H[u])g^R\Big)
\end{aligned}$$

其中数值粒子碰撞时间只出现在指数部分。

第 8 章 统一气体动理学格式

8.1 一维 UGKS 方法

8.1.1 一维 UGKS 的构建逻辑

这部分将给出一个基于 BGK 模型的用于所有流域范围的统一气体动理学格式 (UGKS)。该方法是用于可压缩 Navier-Stokes 解的 BGK-NS 方法向所有 Knudsen 数流动的自然拓展。在这里只给出一维情况下的公式，二维和三维情况下可以直接类比得到。

在离散的空间 x_j 、时间 t^n 和粒子速度 u_k 下，BGK 模型在有限体积框架下的积分解为

$$f_{j,k}^{n+1}=f_{j,k}^{n}+\frac{1}{\Delta x}\int\left(u_k\hat{f}_{j-1/2,k}-u_k\hat{f}_{j+1/2,k}\right)\mathrm{d}t+\frac{1}{\Delta x}\iint\frac{g-f}{\tau}\mathrm{d}x\mathrm{d}t \tag{8.1}$$

其中 $f_{j,k}^n$ 是在第 j 个网格 $x\in[x_{j-1/2},x_{j+1/2}]$ 中的粒子速度为 u_k 的平均分布函数。在计算网格界面处的分布函数时并不采用迎风格式，上述方程中的解 $\hat{f}_{j+1/2,k}$ 是利用 BGK 模型特征线法得到的积分解来构建的：

$$\hat{f}_{j+1/2,k}=f(x_{j+1/2},t,u_k,\xi)=\frac{1}{\tau}\int_{t^n}^{t}g(x',t',u_k,\xi)e^{-(t-t')/\tau}\mathrm{d}t'+e^{-(t-t^n)/\tau}f_{0,k}^n\left(x_{j+1/2}-u_k(t-t^n),t^n,u_k,\xi\right) \tag{8.2}$$

其中 $x'=x_{j+1/2}-u_k(t-t')$ 是粒子轨迹，$f_{0,k}^n$ 是时间 $t=t^n$ 时在网格界面 $x_{j+1/2}$ 附近粒子速度为 u_k 的初始分布函数，即 $f_{0,k}^n=f_0^n(x,t^n,u_k,\xi)$ 。在上述方程中，$f_{0,k}^n$ 在每个时间步开始时是已知的，并且可以使用 TVD 和 ENO 等高分辨率重构方法进行重构。使用下面的非连续重构是为了当网格大小不足以解析流场结构、格式变为激波捕捉方法的时候，能够在统一格式中引入人工耗散。如果解能够被网格充分解析，非连续的重构会自动变成连续的重构。于是在网格界面 $x_{j+1/2}$ 附近、在时间 t^n 的初始分布函数变为

$$f_0(x,t^n,u_k,\xi)=\begin{cases}f_{j+1/2,k}^l(1+\sigma_{j,k}x), & x\le 0\\ f_{j+1/2,k}^r(1+\sigma_{j+1,k}x), & x>0\end{cases} \tag{8.3}$$

其中使用了非线性限制器来重构 $f_{j+1/2,k}^l,f_{j+1/2,k}^r$ 以及相应的斜率 $\sigma_{j,k}$ 。例如，这里我们使用 van Leer 限制器，则网格界面从两侧趋近的分布函数则分别为

$$f_{j+1/2,k}^l=f_{j,k}+(x_{j+1/2}-x_j)\sigma_{j,k}$$
$$f_{j+1/2,k}^r=f_{j+1,k}-(x_{j+1}-x_{j+1/2})\sigma_{j+1,k}$$

且

$$\sigma_{j,k}=\left(\mathrm{sign}(s_1)+\mathrm{sign}(s_2)\right)\frac{|s_1||s_2|}{|s_1|+|s_2|}$$

其中 $s_1=\frac{f_{j,k}-f_{j-1,k}}{x_j-x_{j-1}}$ 以及 $s_2=\frac{f_{j+1,k}-f_{j,k}}{x_{j+1}-x_j}$ 。

平衡态和宏观变量之间存在一一对应的关系。对于式8.2中的平衡态的积分解，我们可以首先使用连续的粒子速度空间来计算这个积分。对于在网格界面 $x_{j+1/2},t=0$ 附近的平衡态 g ，与 BGK-NS 格式相同，它可以展开为两个斜率

$$g=g_0+\frac{\partial g}{\partial x}(x-x_{j+1/2})+\frac{\partial g}{\partial t}t \tag{8.4}$$
$$=g_0+\left(1-H[x-x_{j+1/2}]\right)\bar{a}^l g_0(x-x_{j+1/2})+H[x-x_{j+1/2}]\bar{a}^r g_0(x-x_{j+1/2})+\bar{A}g_0 t \tag{8.5}$$

这里 g_0 是位于 $x=x_{j+1/2}$ 的当地 Maxwell 分布函数。即使 g 在 $x=x_{j+1/2}$ 是连续的，它在 $x<0$ 和 $x\ge 0$ 也分别具有不同的斜率。在平衡态 g 中，$\bar{a}^l,\bar{a}^r$ 和 $\bar{A}$ 是与 Maxwell 分布函数在空间和时间的导数有关。在上述计算空间和时间的平衡态的时候，不需要使用离散的粒子速度空间。基于宏观流场分布，我们可以首先使用连续的粒子速度空间构建积分解，然后在需要的时候使用它对应粒子速度的值。上述平衡态分布函数的表达式来源于 Maxwell 分布在空间和时间的 Taylor 展开。为了得到用于 Navier-Stokes 方程的 AP 格式，需要保留平衡态在空间

和时间的一阶展开。当然，如果想要提高精度阶数或者把 Burnett 方程作为连续流域的渐近极限来求解，那么就需要高阶展开。

记 $\vec{\psi}=(\psi_1,\psi_2,\psi_3)^T=\left[1,u,\frac{1}{2}(u^2+\xi^2)\right]^T$ 。参数 $\bar{a}^l,\bar{a}^r$ 和 $\bar{A}$ 关于粒子速度的依赖关系可以通过 Maxwell 分布的 Taylor 展开得到，具有如下形式

$$\bar{a}^l=\bar{a}_1^l+\bar{a}_2^l u+\bar{a}_3^l\frac{1}{2}(u^2+\xi^2)=\bar{a}_\alpha^l\psi_\alpha$$

$$\bar{a}^r=\bar{a}_1^r+\bar{a}_2^r u+\bar{a}_3^l\frac{1}{2}(u^2+\xi^2)=\bar{a}_\alpha^r\psi_\alpha$$

$$\bar{A}=\bar{A}_1+\bar{A}_2 u+\bar{A}_3\frac{1}{2}(u^2+\xi^2)=\bar{A}_\alpha\psi_\alpha$$

其中 $\alpha=1,2,3$ 且所有的系数 $\bar{a}_1^l,\bar{a}_2^l,\cdots,\bar{A}_3$ 都是当地常数。

g_0 的确定取决于当地宏观量 ρ_0,U_0 和 λ_0 ，即

$$g_0=\rho_0\left(\frac{\lambda_0}{\pi}\right)^{\frac{K+1}{2}}e^{-\lambda\left((u-U_0)^2+\xi^2\right)}$$

这是根据 BGK 模型的兼容性条件唯一确定的。在式8.2中取极限 $t\to 0$ 并将这个解代入到式**??**，在 $x=x_{j+1/2},t=0$ 处的守恒约束给出

$$\vec{W}_0=\int g_0\vec{\psi}\mathrm{d}\Xi=\sum_{k=-N}^{k=N}\omega_k\left(f_{j+1/2,k}^l H[u_k]+f_{j+1/2,k}^r(1-H[u_k])\right)\vec{\psi}_k$$

其中 $\vec{W}_0=(\rho_0,\rho_0U_0,E_0)^T$ 是位于网格界面处时间 $t=0$ 的守恒宏观流场变量，ω_k 是积分权重系数。由于 $f_{j+1/2,k}^l$ 和 $f_{j+1/2,k}^r$ 已经在前面网格界面附近的初始分布函数 f_0 那得到，上述矩可以显式地计算。与 BGK-NS 方法不同的是，由于相空间的离散，BGK-NS 格式中在相空间对 f_0 项的积分在 UGKS 中被替换为了粒子速度的 quadrature 公式。并且，由于粒子速度的离散，此处的气体分布函数具有更多自由度来恢复到高度非平衡流动中的任何形状的分布函数，并且当前的动理学方法的宏观控制方程在一般情况下可以超越 NS 方程。对于平衡态，g_0 中的 λ_0 可以如下得到：

$$\lambda_0=\frac{(K+1)\rho_0}{4\left(E_0-\frac{1}{2}\rho_0U_0^2\right)}$$

于是，式8.5中的 $\bar{a}^l$ 和 $\bar{a}^r$ 可以用如下的关系得到：

$$\frac{\overline{\vec{W}}_{j+1}(x_{j+1})-\vec{W}_0}{\rho_0(x_{j+1}-x_{j+1/2})}=\int\bar{a}^r g_0\vec{\psi}\mathrm{d}\Xi=\overline{M}_{\alpha\beta}^0\begin{pmatrix}\bar{a}_1^r\\ \bar{a}_2^r\\ \bar{a}_3^r\end{pmatrix}=\overline{M}_{\alpha\beta}^0\bar{a}_\beta^r$$

$$\frac{\vec{W}_0-\overline{\vec{W}}_j(x_j)}{\rho_0(x_{j+1/2}-x_j)}=\int\bar{a}^l g_0\vec{\psi}\mathrm{d}\Xi=\overline{M}_{\alpha\beta}^0\begin{pmatrix}\bar{a}_1^l\\ \bar{a}_2^l\\ \bar{a}_3^l\end{pmatrix}=\overline{M}_{\alpha\beta}^0\bar{a}_\beta^l$$

其中矩阵 $\overline{M}_{\alpha\beta}^0=\frac{1}{\rho_0}\int g_0\psi_\alpha\psi_\beta\mathrm{d}\Xi$ 是已知的。因此，$(\bar{a}_1^r,\bar{a}_2^r,\bar{a}_3^r)^T$ 和 $(\bar{a}_1^l,\bar{a}_2^l,\bar{a}_3^l)^T$ 也可以按照 BGK-NS 方法的求解流程来得到。为了求出平衡态里时间演化部分 $\bar{A}$ 的值，我们可以应用下面的条件：在网格界面处 $(x=x_{j+1/2},t=0)$ 处

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int(g-\hat{f})\vec{\psi}\mathrm{d}\Xi=0$$

如果近似认为 $f_{j+1/2}(t)=g_0\left(1-\tau(\bar{a}u+\bar{A})+t\bar{A}\right)$ ，那么结合式8.5可以得到

$$\int(\bar{a}u+\bar{A})\vec{\psi}g_0\mathrm{d}\Xi=\vec{0}$$

进而得到

$$\overline{M}_{\alpha\beta}^0\bar{A}_\beta=\left(\frac{\partial\rho}{\partial t},\frac{\partial(\rho U)}{\partial t},\frac{\partial E}{\partial t}\right)^T=-\frac{1}{\rho_0}\int\left[u\left(\bar{a}^l H[u]+\bar{a}^r(1-H[u])\right)g_0\right]\vec{\psi}\mathrm{d}\Xi$$

至此，我们已经确定了初始分布函数 f_0 和平衡态 g 在当地时间和空间的所有参数。将式8.3和式8.5代入式8.2，并

在 g_0 、$\bar{a}^l$、$\bar{a}^r$ 和 $\bar{A}$ 中取 $u=u_k$ ，则在离散粒子速度 u_k 处的气体分布函数 $\hat{f}(x_{j+1/2},t,u_k,\xi)$ 可以表达为

$$\begin{aligned}\hat{f}_{j+1/2,k}(x_{j+1/2},t) &= (1-e^{-t/\tau})g_0+\Big(\tau(-1+e^{-t/\tau})+te^{-t/\tau}\Big)\bar{a}u_kg_0\\&\quad+\tau\big(t/\tau-1+e^{-t/\tau}\big)\bar{A}g_0+e^{-t/\tau}\Big(f_{j+1/2,k}-u_kt\cdot\sigma_{j+1/2,k}f_{j+1/2,k}\Big)\\&\triangleq\tilde{g}_{j+1/2,k}+\tilde{f}_{j+1/2,k}\end{aligned}\tag{8.6}$$

其中 $\bar{a}=\bar{a}^lH[u_k]+\bar{a}^r(1-H[u_k])$，$f_{j+1/2,k}=H[u_k]f^l_{j+1/2,k}+(1-H[u_k])f^r_{j+1/2,k}$，$\sigma_{j+1/2,k}=H[u_k]\sigma_{j,k}+(1-H[u_k])\sigma_{j+1,k}$，而 $\tilde{g}_{j+1/2,k}$ 是所有与平衡态 g 的积分有关的项，而 $\tilde{f}_{j+1/2,k}$ 是所有由初始条件 f_0 得到的项。上述分布函数中的碰撞时间 τ 由 $\tau=\mu(T_0)/p_0$ 来确定，其中 T_0 是温度，p_0 是压强，且它们两个都可以由网格界面处的 W_0 计算得到。上述时间精确的气体分布函数可以在方程8.1中使用来得到网格界面的通量，因为我们可以计算出该分布函数对 Δt 时间内的积分：

$$\int_0^{\Delta t}f_{j+1/2,k}(t)\mathrm{d}t=\gamma_1g_0+\gamma_2u_k\bar{a}g_0+\gamma_3\bar{A}g_0+\gamma_4f_{j+1/2,k}+\gamma_5u_k\sigma_{j+1/2,k}f_{j+1/2,k}$$

其中系数为

$$\begin{aligned}\gamma_1&=\Delta t+\tau e^{-\Delta t/\tau}-\tau\\\gamma_2&=-\tau\Delta t+2\tau^2-2\tau^2e^{-\Delta t/\tau}-\tau\Delta te^{-\Delta t/\tau}\\\gamma_3&=\frac{1}{2}\Delta t^2-\tau\Delta t-\tau^2e^{-\Delta t/\tau}+\tau^2\\\gamma_4&=\tau-\tau e^{-\Delta t/\tau}\\\gamma_5&=\tau\Delta te^{-\Delta t/\tau}+\tau^2e^{-\Delta t/\tau}-\tau^2\end{aligned}$$

为了高效且准确地离散式8.1中的碰撞项，下面给出一个多尺度的统一公式。我们首先在式8.1中对 ψ 求矩，此时由于对于守恒变量碰撞项将消失，我们得到

$$\vec{W}_j^{n+1}=\vec{W}_j^n+\frac{1}{\Delta x}\int\int_{t^n}^{t^{n+1}}u(\tilde{g}_{j-1/2}-\tilde{g}_{j+1/2})\vec{\psi}\mathrm{d}t\mathrm{d}\Xi+\frac{1}{\Delta x}\sum_k\int_{t^n}^{t^{n+1}}\omega_ku_k(\tilde{f}_{j-1/2,k}-\tilde{f}_{j+1/2,k})\vec{\psi}\mathrm{d}t\tag{8.7}$$

其中 $\tilde{g}_{j+1/2}$ 具有与 $\tilde{g}_{j+1/2,k}$ 相同的表达形式，只是粒子速度取为了连续速度空间 $u_k=u$ 。对平衡态部分 $\tilde{g}$ 的积分可以准确地计算，而非平衡态部分 $\tilde{f}$ 的积分可以通过使用 quadrature 积分法完成。对于守恒变量的更新，上述公式与 BGK-NS 格式的区别在于在上述公式中初始分布函数 f_0 在粒子速度空间的积分采用了离散和的形式。对于追求 NS 解的 BGK-NS 格式，初始气体分布函数 f_0 可以根据 Chapman-Enskog 展开从宏观变量的分布重构出来。因此，初始条件 f_0 的具体形式可以用数学方法重构。在连续流极限下，由于粒子碰撞次数非常多且时间步长要比粒子碰撞时间大得多，平衡态 $\tilde{g}_{j+1/2}$ 的积分的贡献将在最后分布函数 $\hat{f}_{j+1/2,k}$ 的解中占主导地位。$\tilde{g}_{j+1/2}$ 本身给出了一个与 NS 对应的分布函数，而初始项 $\tilde{f}_{j+1/2,k}$ 的贡献消失了。最终，离散形式下的更新的分布函数 $f^{n+1}_{j,k}$ 将会是一个 Chapman-Enskog NS 分布函数。因此，在连续流域范围内，使用连续粒子速度空间的 BGK-NS 格式和使用离散速度空间的 UGKS 方法将变为相同的格式。在连续流域中，使用8.7来更新守恒宏观变量就已经足够来得到 NS 解，因为气体分布函数 $f^{n+1}_{j,k}$ 可以通过更新的守恒变量重构得到。因此，对于只有连续流域的情形，就像 BGK-NS 格式那样，我们基本上不需要更新气体分布函数。这也表明了，在守恒流场变量的更新方面，UGKS 方法是在连续流极限下的 AP 方法。但是，UGKS 方法并不局限于连续流域。在高度非平衡态的流域中，用式8.7来更新守恒变量仍然是正确的。例如，在无碰撞极限下，非平衡态部分 $\tilde{f}_{j-1/2,k}$ 和 $\tilde{f}_{j+1/2,k}$ 将占据主导作用，且平衡态部分的贡献消失了。因此，UGKS 方法也能得到正确的无碰撞极限解。

一般地，基于上述更新的守恒变量，我们可以立刻得到每个网格内的平衡态气体分布函数 $g^{n+1}_{j,k}$ ，因此基于式8.1，UGKS 方法更新气体分布函数的方式变为

$$f^{n+1}_{j,k}=f^n_{j,k}+\frac{1}{\Delta x}\Big(\int_{t^n}^{t^{n+1}}u_k(\tilde{g}_{j-1/2,k}-\tilde{g}_{j+1/2,k})\mathrm{d}t+\int_{t^n}^{t^{n+1}}u_k(\tilde{f}_{j-1/2,k}-\tilde{f}_{j+1/2,k})\mathrm{d}t\Big)+\frac{\Delta t}{2}\Big(\frac{g^{n+1}_{j,k}-f^{n+1}_{j,k}}{\tau^{n+1}}+\frac{g^n_{j,k}-f^n_{j,k}}{\tau^n}\Big)$$

其中碰撞项的时间积分采用梯形法则 (trapezoidal rule)。所以，由上式，UGKS 方法更新气体分布函数的最终表

达式为

$$f_{j,k}^{n+1}=\Big(1+\frac{\Delta t}{2\tau^{n+1}}\Big)^{-1}\Big[f_{j,k}^{n}+\frac{1}{\Delta x}\Big(\int_{t^n}^{t^{n+1}}u_k(\tilde{g}_{j-1/2,k}-\tilde{g}_{j+1/2,k})\mathrm{d}t+\int_{t^n}^{t^{n+1}}u_k(\tilde{f}_{j-1/2,k}-\tilde{f}_{j+1/2,k})\mathrm{d}t\Big)+\frac{\Delta t}{2}\Big(\frac{g_{j,k}^{n+1}}{\tau_j^{n+1}}+\frac{g_{j,k}^{n}-f_{j,k}^{n}}{\tau_j^{n}}\Big)\Big]$$

在上述更新解的过程中不需要任何迭代。粒子碰撞时间 τ_j^n 和 τ_j^{n+1} 由网格内的温度和压强定义，即 $\tau_j^n = \mu(T_j^n)/p_j^n$ 和 $\tau_j^{n+1}=\mu(T_j^{n+1})/p_j^{n+1}$ ，由于式8.7更新了宏观流场变量它们都是已知的。

8.1.2 动态混合方法

UGKS 格式是一种宏观和微观变量同步更新的多尺度混合方法。传统的混合方法是基于几何的，在划分的不同区域求解不同的控制方程，同时不同区域的交界面通过缓冲区连接起来。但是，UGKS 格式不像大多数混合方法那样求解不同的控制方程，而是以计算网格界面处的通量函数的方式在将它们耦合起来。

在连续流域中，强烈的粒子碰撞将使系统接近平衡状态。因此，式8.6中基于平衡态 $\tilde{g}_{j+1/2,k}$ 的积分的部分将自动在网格界面处占主导地位。可以看出，在光滑流动区域 $\tilde{g}_{j+1/2,k}$ 给出了准确的 NS 气体分布函数。由于宏观流动变量与平衡态分布之间存在一一对应的关系，因此平衡态部分的积分也可以看作是格式的宏观组成部分。在粒子碰撞不足的自由分子极限下，网格界面处的积分解将自动给出一个纯粹的迎风格式，其中来自 $\tilde{f}_{j+1/2,k}$ 的粒子输运将是主要部分。因此，UGKS 也捕捉了无碰撞极限下的流动物理。这种统一的方法可以看作是一种动态混合方法而不是几何混合方法。

大多数其他方法使用几何混合方法的原因是，它们在网格界面处的通量函数完全基于动能的迎风离散化，即式8.6中的 $\tilde{f}_{j+1/2,k}$ 项。而我们知道，动能迎风只有在无碰撞或高度非平衡的状态下才是正确的。因此，在传统的混合格式中，必须将计算域划分为平衡流域和非平衡流域。物理上讲，这种几何划分都是人为的，并且不能划分出两种方法都适用的区域，因为两种方法在通量计算的时候存在显著的动力学差异。

在 UGKS 方法中采用了一个单一的计算域，通过求解全近似 Boltzmann 方程得到粒子行为的动态差异，该方程从连续介质到稀薄流动都有效。当然，为了节省计算时间，我们也可以开发一种混合方法，将目前的 UGKS 格式作为非平衡流求解器，将 BGK-NS 方法作为连续流求解器。在连续流域下，这种混合格式实际上只是简单地将式8.3的离散粒子速度的分布函数 f_0 替换为具有连续粒子速度空间的 Chapman-Enskog NS 类的分布函数 f_0 。

8.1.3 渐近保持性质

在连续流极限下对 NS 解的渐近保持 (Asymtotic preserving) 是动理学格式需要的性质。为了设计一种对 NS 方程和自由分子极限都有效的 AP 方法，需要在网格界面的通量计算中求解完整 BGK 方程。使用上述方程的必要性可以从以下方面来理解。

首先，在不考虑数值网格的前提下，由于 Boltzmann 方程在各处耦合了粒子输运和碰撞，在空间和时间的任意点 (x,t) 都存在碰撞和输运。例如，$u\frac{\partial f}{\partial x}(x,t)$ 和 $\frac{g-f}{\tau}$ 是关于 x 和 t 的连续函数。当在网格界面计算粒子输运的时候，动力学上在网格界面附近的小范围内的所有粒子都会通过输运和碰撞影响粒子的演化。换句话说，这些分子在穿越网格界面的时候也会承受粒子碰撞。只考虑式8.6中 $\tilde{f}_{j+1/2,k}$ 项的无碰撞的或迎风离散在物理上都是不正确的。

UGKS 方法特别的一点在于，在计算网格界面处的通量的时候求解的是含碰撞的 BGK 模型。在连续流域中，只有守恒流场变量被考虑。式8.7中更新守恒变量的通量计算此时就是离散版本的针对 NS 方程的 BGK-NS 方法。对于 UGKS 方法，处理连续流时，我们可以使用远大于粒子碰撞时间的时间步长，即 $\Delta t \gg \tau$ 。在这种情况下，在网格界面处的通量计算的分布函数式8.6将变成

$$f_{j+1/2}(t)=g_0\Big(1-\tau(\bar{a}u+\bar{A})+t\bar{A}\Big)$$

这正是 NS 解的 Chapman-Enskog 展开，其中 $\bar{a}=\bar{a}^l H[u_k]+\bar{a}^r(1-H[u_k])$ 。换句话说，在连续流极限下，来自平衡态的积分解占主导地位，且宏观流场变量的更新满足 NS 解。于是，UGKS 在每个网格更新宏观量的时候给

出了准确的 NS 解。UGKS 格式是一个 AP 方法且它在连续流域的准确度为 $O\big(\tau(\Delta t)^2\big)$ 。理论上，在连续流极限下没有必要计算分布函数。如果像许多其他动理学方法那样，在 $\tilde{f}_{j+1/2,k}$ 通量计算的时候使用简单地迎风方法，那么在其控制方程中将会引入与时间步长 Δt 成正比的人工粘性项。所以，在这种情况下，这样的动理学格式只对 Euler 方程满足渐近保持性质。

8.1.4 UGKS 确定时间步长的方式

在连续流极限下，UGKS 格式的时间步长通过 CFL 条件确定：

$$\Delta t = \mathrm{CFL}\frac{\Delta x}{|U|+c}$$

其中 CFL 是 CFL 数，c 为声速。另一方面，粒子碰撞时间定义为

$$\tau = \frac{\mu}{p} = \frac{\rho|U|\Delta x}{p\mathrm{Re}}$$

其中 $\mathrm{Re} = \frac{\rho\Delta x|U|}{\mu}$ 是网格单元的雷诺数。取估计

$$|U| + c \simeq c$$

该估计在低速流动下是正确的，且在高超声速流动中也是近似正确的，因为流动速度与声速有相同的阶，于是我们有

$$\frac{\Delta t}{\tau} = \frac{\mathrm{Re}}{\mathrm{Ma}}$$

其中 Ma 为马赫数。所以，对于连续流的计算，即使对于适中的网格雷诺数，比如 10^4 ，UGKS 的时间步长也能够取得比粒子碰撞时间大非常多。上式也可以改写成如下的形式

$$\Delta t = \frac{\tau}{\mathrm{Kn}}$$

其中 $\mathrm{Kn} = \frac{\mathrm{Ma}}{\mathrm{Re}}$ 是当地网格 Knudsen 数。所以，对于包含了从连续流到自由分子流的流域，比如喷嘴流 (nozzle flows)，UGKS 使用的时间步长可以取为上述时间步长中最大的那个。这样，整个算域中使用的时间步长在连续流域满足 $\Delta t \gg \tau$ 且在稀薄气体流域满足 $\Delta t < \tau$ 。与其他仅通过最小粒子碰撞时间来控制时间步长的格式对比，UGKS 方法显然要更加高效。

8.1.5 UGKS 的 Prandtl 数修正

UGKS 基于 BGK 模型，而 BGK 模型只给出固定的单位 Prandtl 数。对于真实的气体，由于分子间的相互作用力，对于单原子气体 Prandtl 数大约等于 $2/3$ 。为了将 UGKS 方法拓展到能够模拟具有任意真实的 Prandtl 数的流动，该格式中的热通量需要被修正。传统上，已经有许多方法被提出来修正 Prandtl 数。其中比较著名的一个是 Ellipsoid BGK 模型、速度依赖粒子碰撞时间模型以及 Shakhov 模型。由于热通量是一个宏观流场变量，它与集体流场特性有关，它很难直接地在气体分布函数的更新时进行修正。幸运的是，UGKS 是一个多尺度方法，微观气体分布函数和宏观守恒流场变量在格式中都进行了更新过程。所以，与 BGK-NS 方法类似，在更新守恒流场变量的时候，我们可以如下地修正式8.7中网格界面处的热通量。在式8.7中的通量计算中，网格界面通量如下给出：

$$F_{j+1/2} = \int u\tilde{g}_{j+1/2}\psi \mathrm{d}\Xi + \sum_k u_k \tilde{f}_{j+1/2,k}\psi$$

其中包括了能量通量 F_E 。因此，修正 Prandtl 数最简单的方法就是改变热通量。在网格界面处的热通量为

$$q_{j+1/2} = \int \frac{1}{2}(u-U_{j+1/2})\Big((u-U_{j+1/2})^2+\xi^2\Big)\psi\tilde{g}_{j+1/2}\mathrm{d}\Xi + \sum_k \frac{1}{2}(u_k-U_{j+1/2})\Big((u_k-U_{j+1/2})^2+\xi^2\Big)\psi\tilde{f}_{j+1/2,k}$$

其中网格界面处的平均流动速度定义为

$$U_{j+1/2} = \frac{\int u\tilde{g}_{j+1/2}\mathrm{d}\Xi + \sum_k u_k\tilde{f}_{j+1/2,k}}{\int \tilde{g}_{j+1/2}\mathrm{d}\Xi + \sum_k \tilde{f}_{j+1/2,k}}$$

所以，在给定了 Prandtl 数 Pr 滞后，我们只需要在将原本的能量通量替换为

$$F_E^{new} = F_E + \left(\frac{1}{\mathrm{Pr}} - 1\right) q_{j+1/2}$$

在更新宏观变量时有了正确的 Prandtl 数之后，这也进一步影响了下一个时间步的平衡态 g^{n+1} 的构建，因此微观气体分布函数的更新也同样被修正了。上述修正热通量的步骤与 DSMC 方法有一定的相似性。例如，在 UGKS 中碰撞后的粒子速度与方向由修正后的 g^{n+1} 控制。

8.1.6 UGKS 的无碰撞极限

在自由分子流极限下，即 $\tau \to \infty$ ，UGKS 格式变为

$$f_{j,k}^{n+1} = f_{j,k}^n - \frac{1}{\Delta x}\int_{t^n}^{t^{n+1}} u_k(\hat{f}_{j-1/2,k} - \hat{f}_{j+1/2,k})\mathrm{d}t$$

其中只有 BGK 模型的积分解中的初始项 f_0 保留了下来，且

$$\hat{f}_{j+1/2,k}(x,0) = \begin{cases} f_{j+1/2,k}^l(1 - u_k t\sigma_{j,k}), & u_k \geq 0 \\ f_{j+1/2,k}^r(1 - u_k t\sigma_{j+1,k}), & u_k < 0 \end{cases}$$

上述方程是纯粹的自由分子输运方程。所以，在该极限情形下 UGKS 仍然是有效的。

8.2 单原子气体的 UGKS 方法

8.2.1 三维流动的 UGKS

参考文献A Comparison and Unification of Ellipsoidal Statistical and Shakhov BGK Models。在 $t = t^n$ 时，根据已知的宏观场 ρ_i^n、$\vec{U}_i^n$ 和 T_i^n ，可以得到 $\lambda_i^n = \frac{1}{2RT_i^n}$ 。然后，基于给定的速度空间离散方法与离散数目可以确定离散速度空间 $\vec{u}_k$ 以及相应的积分权重系数 ω_k 。并且，根据 CFL 条件可以确定时间步长：

$$\Delta t = \mathrm{CFL}\frac{\Delta x}{|U^n| + c}$$

这里上标 n 表示第 n 时间级，Δx 是当地网格等效尺度，c 是声速。这里的 $\mu(T_i^n)$ 根据所选定的粒子模型来确定。

根据已知的宏观量场来初始化各离散速度气体分布函数，一般而言可以直接使用 Maxwell 分布进行初始化：

$$f_{i,k}^n = g_{i,k}^n = \rho_i^n\left(\frac{\lambda_i^n}{\pi}\right)^{3/2} e^{-\lambda_i^n|\vec{u}_k - \vec{U}_i^n|^2}$$

同时对宏观量以及 Shakhov 模型修正项进行初始化：

$$\begin{aligned}
p_i^n &= \frac{1}{3}\sum_k \omega_k|\vec{u}_k - \vec{U}_i^n|^2 f_{i,k}^n \\
\vec{q}_i^n &= \frac{1}{2}\sum_k \omega_k(\vec{u}_k - \vec{U}_i^n)|\vec{u}_k - \vec{U}_i^n|^2 f_{i,k}^n \\
\tau_i^n &= \frac{\mu(T_i^n)}{p_i^n} \\
g_{i,k}^{+(n)} &= g_{i,k}^n(1 - \mathrm{Pr})(\vec{u}_k - \vec{U}_i^n)\cdot\vec{q}_i^n\left(\frac{|\vec{u}_k - \vec{U}_i^n|^2}{RT_i^n} - 5\right)\Big/(5p_i^n RT_i^n)
\end{aligned}$$

初始化完成后，使用 TVD 限制器或 WENO 等其他插值方法对网格界面处的分布函数进行重构，比如使用 TVD 限制器的形式则为

$$\begin{cases} f_{ij,k}^{l,n} = f_{i,k}^n + \phi\frac{\partial f_{i,k}}{\partial \vec{x}}\cdot(\vec{x}_{ij} - \vec{x}_i) \\ f_{ij,k}^{r,n} = f_{j,k}^n + \phi\frac{\partial f_{j,k}}{\partial \vec{x}}\cdot(\vec{x}_{ij} - \vec{x}_j) \end{cases}$$

其中 ϕ 为 TVD 限制器函数。

计算网格界面处的守恒宏观量:

$$\vec{W}_{ij}=\sum_k \omega_k f_{ij,k}\vec{\psi}_k$$

其中

$$\begin{aligned}
\vec{W}_{ij} &= \left(\rho_{ij}, \rho_{ij}U_{ij}, \rho_{ij}V_{ij}, \rho_{ij}W_{ij}, \rho_{ij}E_{ij}\right)^T \\
f_{ij,k} &= f^l_{ij,k}H[u_{n,k}] + f^r_{ij,k}(1-H[u_{n,k}]) \\
\vec{\psi}_k &= \left(1, u_k, v_k, w_k, \frac{1}{2}|\vec{u}_k|^2\right)^T
\end{aligned}$$

而 $u_{n,k}=\vec{u}_k\cdot\vec{n}$ 表示沿网格界面法线方向的由网格 i 指向网格 j 的粒子平动速度分量，ω_k 为当地相空间权重。

基于以上守恒宏观量计算网格界面处的 λ_{ij} 、温度、压力、热通量和粒子碰撞时间:

$$\begin{aligned}
\lambda_{ij} &= \frac{1}{\frac{4}{3}(E_{ij}-\frac{1}{2}|\vec{U}_{ij}|^2)} \\
T_{ij} &= \frac{1}{2R\lambda_{ij}} \\
p_{ij} &= \frac{1}{3}\sum_k \omega_k|\vec{u}_k-\vec{U}_{ij}|^2 f_{ij,k} \\
\vec{q}_{ij} &= \frac{1}{2}\sum_k \omega_k(\vec{u}_k-\vec{U}_{ij})|\vec{u}_k-\vec{U}_{ij}|^2 f_{ij,k} \\
\tau_{ij} &= \frac{\mu(T_{ij})}{p_{ij}}
\end{aligned}$$

计算网格界面处的 Maxwell 分布与 Shakhov 模型修正项:

$$\begin{aligned}
g_{ij,k} &= \rho_{ij}\left(\frac{\lambda_{ij}}{\pi}\right)^{3/2} e^{-\lambda_{ij}|\vec{u}_k-\vec{U}_{ij}|^2} \\
g^+_{ij,k} &= g_{ij,k}(1-\mathrm{Pr})(\vec{u}_k-\vec{U}_{ij})\cdot\vec{q}_{ij}\left(\frac{|\vec{u}_k-\vec{U}_{ij}|^2}{RT_{ij}}-5\right)\Big/(5p_{ij}RT_{ij})
\end{aligned}$$

计算网格界面处 Maxwell 分布的空间梯度系数和时间梯度系数，此时计算的是各网格界面局部坐标下的系数:

$$\begin{aligned}
a^L_{ij,k} &= a^L_1\psi'_1 + a^L_2\psi'_2 + a^L_3\psi'_3 + a^L_4\psi'_4 + a^L_5\psi'_5 \\
a^R_{ij,k} &= a^R_1\psi'_1 + a^R_2\psi'_2 + a^R_3\psi'_3 + a^R_4\psi'_4 + a^R_5\psi'_5 \\
b_{ij,k} &= b_1\psi'_1 + b_2\psi'_2 + b_3\psi'_3 + b_4\psi'_4 + b_5\psi'_5 \\
c_{ij,k} &= c_1\psi'_1 + c_2\psi'_2 + c_3\psi'_3 + c_4\psi'_4 + c_5\psi'_5 \\
A_{ij,k} &= A_1\psi'_1 + A_2\psi'_2 + A_3\psi'_3 + A_4\psi'_4 + A_5\psi'_5
\end{aligned}$$

其中 $\vec{\psi}'=\mathbf{T}\vec{\psi}$ 是转换为对应网格界面局部坐标下的主要变量，而 $\mathbf{T}$ 则为对应网格界面的坐标转换张量。

这些系数满足

$$\frac{\mathbf{T}(\vec{W}_{ij}-\vec{W}_i)}{(\vec{x}_{ij}-\vec{x}_i)\cdot\vec{n}} = \int a^L g'_{ij}\vec{\psi}'\mathrm{d}\Xi' = \mathbf{M}'_{ij}\begin{pmatrix}a^L_1\\a^L_2\\a^L_3\\a^L_4\\a^L_5\end{pmatrix}, \quad \frac{\mathbf{T}(\vec{W}_j-\vec{W}_{ij})}{(\vec{x}_j-\vec{x}_{ij})\cdot\vec{n}} = \int a^R g'_{ij}\vec{\psi}'\mathrm{d}\Xi' = \mathbf{M}'_{ij}\begin{pmatrix}a^R_1\\a^R_2\\a^R_3\\a^R_4\\a^R_5\end{pmatrix}$$

$$\int bg'_0\vec{\psi}'\mathrm{d}\Xi' = \mathbf{M}'_{ij}\begin{pmatrix}b_1\\b_2\\b_3\\b_4\\b_5\end{pmatrix} = \sum_k\left(\frac{\partial f_{i,k}}{\partial y'}H[u'_k] + \frac{\partial f_{j,k}}{\partial y'}(1-H[u'_k])\right)\vec{\psi}'_k$$

$$\int cg_0'\vec{\psi}'\mathrm{d}\Xi' = \mathbf{M}_{ij}'\begin{pmatrix}c_1\\c_2\\c_3\\c_4\\c_5\end{pmatrix} = \sum_k\Big(\frac{\partial f_{i,k}}{\partial z'}H[u_k'] + \frac{\partial f_{j,k}}{\partial z'}(1-H[u_k'])\Big)\vec{\psi}_k'$$

$$\mathbf{M}_{ij}'\begin{pmatrix}A_1\\A_2\\A_3\\A_4\\A_5\end{pmatrix} = -\int(au'+bv'+cw')g_0'\vec{\psi}'\mathrm{d}\Xi' = -\int_{u'>0}(a^Lu'+bv'+cw')g_0'\vec{\psi}'\mathrm{d}\Xi' - \int_{u'<0}(a^Ru'+bv'+cw')g_0'\vec{\psi}'\mathrm{d}\Xi'$$

其中 $\mathbf{M}_{ij}'$ 是在局部坐标系下表示的系数矩阵；u' 是粒子速度在局部坐标系下的 x' 分量，满足 $u'=\vec{u}\cdot\vec{n}$ ；而 $\frac{\partial f}{\partial y'}$ 和 $\frac{\partial f}{\partial z'}$ 是 $\phi\frac{\partial f}{\partial \vec{x}}$ 在局部坐标下的切向分量，也即分别为 $\mathbf{T}\phi\frac{\partial f}{\partial \vec{x}}$ 的 y' 分量和 z' 分量；另外还有 $a=a^LH[u']+a^R(1-H[u'])$ 。

计算网格界面处局部坐标系下 Δt 时间内速度分布函数的单位面积的对流通量：

$$\begin{aligned}\int_{t^n}^{t^{n+1}} u_k'f_{ij,k}'(t)\mathrm{d}t = u_k'\Big[&\gamma_1(g_{ij,k}'+g_{ij,k}^{+'}) + \gamma_2(a_{ij,k}u_k'+b_{ij,k}v_k'+c_{ij,k}w_k')g_{ij,k}' + \gamma_3A_{ij,k}g_{ij,k}'\\ &+\gamma_4f_{ij,k}^{n'} + \gamma_5(u_k'\frac{\partial f_{ij,k}}{\partial x'} + v_k'\frac{\partial f_{ij,k}}{\partial y'} + w_k'\frac{\partial f_{ij,k}}{\partial z'})\Big]\end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}a_{ij,k} &= H[u_k']a_{ij,k}^L + (1-H[u_k'])a_{ij,k}^R\\ f_{ij,k}^{n'} &= H[u_k']f_{ij,k}^{L'} + (1-H[u_k'])f_{ij,k}^{R'}\\ \frac{\partial f_{ij,k}}{\partial x'} &= H[u_k']\frac{\partial f_{i,k}}{\partial x'} + (1-H[u_k'])\frac{\partial f_{j,k}}{\partial x'}\\ \frac{\partial f_{ij,k}}{\partial y'} &= H[u_k']\frac{\partial f_{i,k}}{\partial x'} + (1-H[u_k'])\frac{\partial f_{j,k}}{\partial y'}\\ \frac{\partial f_{ij,k}}{\partial z'} &= H[u_k']\frac{\partial f_{i,k}}{\partial x'} + (1-H[u_k'])\frac{\partial f_{j,k}}{\partial z'}\end{aligned}$$

并且五个系数分别为

$$\begin{aligned}\gamma_1 &= \Delta t + \tau_{ij}e^{-\Delta t/\tau_{ij}} - \tau_{ij} = \Delta t - \gamma_4\\ \gamma_2 &= -\tau_{ij}\Delta t + 2\tau_{ij}^2 - 2\tau_{ij}^2e^{-\Delta t/\tau} - \tau_{ij}\Delta te^{-\Delta t/\tau_{ij}} = -\tau_{ij}\gamma_1 - \gamma_5\\ \gamma_3 &= \frac{1}{2}\Delta t^2 - \tau_{ij}\Delta t - \tau_{ij}^2e^{-\Delta t/\tau_{ij}} + \tau_{ij}^2 = \frac{1}{2}\Delta t^2 - \tau_{ij}\gamma_1\\ \gamma_4 &= \tau_{ij} - \tau_{ij}e^{-\Delta t/\tau_{ij}}\\ \gamma_5 &= \tau_{ij}\Delta te^{-\Delta t/\tau_{ij}} + \tau_{ij}^2e^{-\Delta t/\tau_{ij}} - \tau_{ij}^2 = \tau_{ij}\Delta te^{-\Delta t/\tau_{ij}} - \tau_{ij}\gamma_4\end{aligned}$$

计算下一个时间级的各宏观守恒量：

$$\vec{W}_i^{n+1} = \vec{W}_i^n - \frac{1}{\Omega_i}\sum_{j\in N(i)}S_{ij}\mathbf{T}^T\Big(\sum_k\omega_k\vec{\psi}_k'\int_{t^n}^{t^{n+1}}u_k'f_{ij,k}'(t)\mathrm{d}t\Big)$$

其中 ω_k 是当地相空间权重系数，$\mathbf{T}^T$ 是转换张量的转置，表示从局部坐标系到全局坐标系的转换。由这些宏观

守恒量可以计算出下一个时间级的部分宏观量以及 Maxwell 分布：

$$\lambda_i^{n+1} = \frac{1}{\frac{4}{3}(E_i^{n+1} - \frac{1}{2}|\vec{U}_i^{n+1}|^2)}$$
$$T_i^{n+1} = \frac{1}{2R\lambda_i^{n+1}}$$
$$g_{i,k}^{n+1} = \rho_i^{n+1}\left(\frac{\lambda_i^{n+1}}{\pi}\right)^{3/2} e^{-\lambda_i^{n+1}|\vec{u}_k - \vec{U}_i^{n+1}|^2}$$

接着先按照矩形估计的碰撞项计算中间更新态分布函数 $f_{i,k}^*$ ：

$$f_{i,k}^* = f_{i,k}^n - \frac{1}{\Omega_i}\sum_{j\in N(i)} S_{ij}\mathbf{T}^T \int_{t^n}^{t^{n+1}} u_k' f_{ij,k}'(t)\mathrm{d}t + \Delta t \frac{g_{i,k}^n + g_{i,k}^{+(n)} - f_{i,k}^n}{\tau_i^n}$$

而利用该中间更新态分布函数可以计算出中间更新态宏观量并据此计算中间更新态 Shakhov 模型修正项：

$$p_i^* = \frac{1}{3}\sum_k \omega_k |\vec{u}_k - \vec{U}_i^{n+1}|^2 f_{i,k}^*$$
$$\vec{q}_i^* = \frac{1}{2}\sum_k \omega_k (\vec{u}_k - \vec{U}_i^{n+1})\left|\vec{u}_k - \vec{U}_i^{n+1}\right|^2 f_{i,k}^*$$
$$\tau_i^* = \frac{\mu(T_i^{n+1})}{p_i^*}$$
$$g_{i,k}^{+(*)} = g_{i,k}^{n+1}(1-\mathrm{Pr})(\vec{u}_k - \vec{U}_i^{n+1})\cdot\vec{q}_i^*\left(\frac{|\vec{u}_k - \vec{U}_i^{n+1}|^2}{RT_i^{n+1}} - 5\right)\Big/(5p_i^* RT_i^{n+1})$$

进而可以计算出最终更新的气体分布函数：

$$f_{i,k}^{n+1} = \left(1 + \frac{\Delta t}{2\tau_i^*}\right)^{-1}\left[f_{i,k}^n - \frac{1}{\Omega_i}\sum_{j\in N(i)} S_{ij}\mathbf{T}^T \int_{t^n}^{t^{n+1}} u_k' f_{ij,k}'(t)\mathrm{d}t + \frac{\Delta t}{2}\left(\frac{g_{i,k}^{n+1} + g_{i,k}^{+(*)}}{\tau_i^*} + \frac{g_{i,k}^n - f_{i,k}^n}{\tau_i^n}\right)\right]$$

由此可以计算出最终更新的宏观量与 Shakhov 模型修正项：

$$p_i^{n+1} = \frac{1}{3}\sum_k \omega_k |\vec{u}_k - \vec{U}_i^{n+1}|^2 f_{i,k}^{n+1}$$
$$\vec{q}_i^{n+1} = \frac{1}{2}\sum_k \omega_k (\vec{u}_k - \vec{U}_i^{n+1})\left|\vec{u}_k - \vec{U}_i^{n+1}\right|^2 f_{i,k}^{n+1}$$
$$\tau_i^{n+1} = \frac{\mu(T_i^{n+1})}{p_i^{n+1}}$$
$$g_{i,k}^{+(n+1)} = g_{i,k}^{n+1}(1-\mathrm{Pr})(\vec{u}_k - \vec{U}_i^{n+1})\cdot\vec{q}_i^{n+1}\left(\frac{|\vec{u}_k - \vec{U}_i^{n+1}|^2}{RT_i^{n+1}} - 5\right)\Big/(5p_i^{n+1} RT_i^{n+1})$$

之后又开始进行网格界面处气体分布函数的重构，进行迭代循环。

8.2.2 一、二维流动的 UGKS

参考User's Manual for UGKS1D and UGKS2D Codes。为了减少离散速度节点的数量、降低计算开支，就需要针对低维流动的情况对方程进行简化。首先引入约化分布函数

$$h = \int_{-\infty}^{+\infty} f\mathrm{d}\xi, \quad b = \int_{-\infty}^{+\infty} \xi^2 f\mathrm{d}\xi$$

其中 ξ 表示内自由度。[1]相应的约化 Sharkhov 模型平衡态则满足

$$h^+ = H + H^+, \quad b^+ = B + B^+$$

其中相应的约化 Maxwell 分布为

$$H = \int_{-\infty}^{+\infty} g\mathrm{d}\xi = \rho\left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{D/2} e^{-\lambda|\vec{u}-\vec{U}|^2}, \quad B = \int_{-\infty}^{+\infty} \xi^2 g\mathrm{d}\xi = \frac{3-D}{2\lambda}H$$

[1]例如，对于沿 x 方向的一维流动，$\mathrm{d}\xi = \mathrm{d}v\mathrm{d}w$ 且 $\xi^2 = v^2 + w^2$ ；而对于沿 xy 平面的二维流动，$\mathrm{d}\xi = \mathrm{d}w$ 且 $\xi^2 = w^2$ 。

其中 D 表示流动的维度数，并且需要注意的是，这里的 $\vec{u}$ 与 $\vec{U}$ 在忽略的维度方向上的分量始终为零。进而可以得到相应的约化 g^+ 项为

$$H^+ = \int_{-\infty}^{+\infty} g^+ \mathrm{d}\xi = H\frac{1-\mathrm{Pr}}{5pRT}(\vec{u}-\vec{U})\cdot\vec{q}\Big(\frac{|\vec{u}-\vec{U}|^2}{RT}-2-D\Big)$$

$$B^+ = \int_{-\infty}^{+\infty} \xi^2 g^+ \mathrm{d}\xi = B\frac{1-\mathrm{Pr}}{5pRT}(\vec{u}-\vec{U})\cdot\vec{q}\Big(\frac{|\vec{u}-\vec{U}|^2}{RT}-D\Big)$$

利用以上的约化参数，守恒量的求矩计算变为

$$\rho = \int_{-\infty}^{+\infty} f\mathrm{d}\vec{u}\mathrm{d}\xi = \int_{-\infty}^{+\infty} h\mathrm{d}\vec{u} = \sum_k \omega_k h_k$$

$$\rho\vec{U} = \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{u}f\mathrm{d}\vec{u}\mathrm{d}\xi = \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{u}h\mathrm{d}\vec{u} = \sum_k \omega_k\vec{u}_k h_k$$

$$\rho E = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2}(|\vec{u}|^2+\xi^2)f\mathrm{d}\vec{u}\mathrm{d}\xi = \frac{1}{2}\Big(\int_{-\infty}^{+\infty}|\vec{u}|^2h\mathrm{d}\vec{u} + \int_{-\infty}^{+\infty} b\mathrm{d}\vec{u}\Big) = \frac{1}{2}\Big(\sum_k \omega_k|\vec{u}_k|^2h_k + \sum_k\omega_k b_k\Big)$$

而宏观量压强、热通量的计算则变为

$$\begin{aligned} p &= \frac{1}{3}\int_{-\infty}^{+\infty}(|\vec{u}-\vec{U}|^2+\xi^2)f\mathrm{d}\vec{u}\mathrm{d}\xi = \frac{1}{3}\Big(\int_{-\infty}^{+\infty}|\vec{u}-\vec{U}|^2h\mathrm{d}\vec{u} + \int_{-\infty}^{+\infty} b\mathrm{d}\vec{u}\Big) \\ &= \frac{1}{3}\Big(\sum_k \omega_k|\vec{u}_k-\vec{U}|^2h_k + \sum_k\omega_k b_k\Big) = \frac{1}{3}\sum_k\omega_k(|\vec{u}_k-\vec{U}|^2h_k+b_k) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \vec{q} &= \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}(\vec{u}-\vec{U})(|\vec{u}-\vec{U}|^2+\xi^2)f\mathrm{d}\vec{u}\mathrm{d}\xi = \frac{1}{2}\Big(\int_{-\infty}^{+\infty}(\vec{u}-\vec{U})|\vec{u}-\vec{U}|^2h\mathrm{d}\vec{u} + \int_{-\infty}^{+\infty}(\vec{u}-\vec{U})b\mathrm{d}\vec{u}\Big) \\ &= \frac{1}{2}\Big(\sum_k \omega_k(\vec{u}_k-\vec{U})|\vec{u}_k-\vec{U}|^2h_k + \sum_k\omega_k(\vec{u}_k-\vec{U})b_k\Big) = \frac{1}{2}\sum_k\omega_k(\vec{u}_k-\vec{U})(|\vec{u}_k-\vec{U}|^2h_k+b_k) \end{aligned}$$

并且，约化分布函数 h 与 b 的通量的计算方式分别为

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} F_{ij,k}^h\mathrm{d}t = \int_{t^n}^{t^{n+1}}\int_{-\infty}^{+\infty} u_{n,k}f_{ij,k}\mathrm{d}\xi\mathrm{d}t = u_{n,k}\begin{pmatrix}\gamma_1\\ \gamma_2\\ \gamma_3\\ \gamma_4\\ \gamma_5\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix} H_{ij,k}+H_{ij,k}^+ \\ u_{n,k}\big[a_{ij,1}H_{ij,k}+(\vec{a}_{ij,24}\cdot\vec{u}_k)H_{ij,k}+\frac{1}{2}a_{ij,5}(|\vec{u}_k|^2H_{ij,k}+B_{ij,k})\big] \\ A_{ij,1}H_{ij,k}+(\vec{A}_{ij,24}\cdot\vec{u}_k)H_{ij,k}+\frac{1}{2}A_{ij,3}(|\vec{u}_k|^2H_{ij,k}+B_{ij,k}) \\ h_{ij,k} \\ u_{n,k}\sigma_{ij,k}^h \end{pmatrix}$$

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} F_{ij,k}^b\mathrm{d}t = \int_{t^n}^{t^{n+1}}\int_{-\infty}^{+\infty} u_{n,k}\xi^2f_{ij,k}\mathrm{d}\xi\mathrm{d}t = u_{n,k}\begin{pmatrix}\gamma_1\\ \gamma_2\\ \gamma_3\\ \gamma_4\\ \gamma_5\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix} B_{ij,k}+B_{ij,k}^+ \\ u_{n,k}\big[a_{ij,1}B_{ij,k}+(\vec{a}_{ij,24}\cdot\vec{u}_k)B_{ij,k}+\frac{1}{2}a_{ij,5}(|\vec{u}_k|^2B_{ij,k}+\frac{5-D}{2\lambda_{ij}}B_{ij,k})\big] \\ A_{ij,1}B_{ij,k}+(\vec{A}_{ij,24}\cdot\vec{u}_k)B_{ij,k}+\frac{1}{2}A_{ij,3}(|\vec{u}_k|^2B_k+\frac{5-D}{2\lambda_{ij}}B_{ij,k}) \\ b_{ij,k} \\ u_{n,k}\sigma_{ij,k}^b \end{pmatrix}$$

守恒宏观量的通量则可以使用约化分布函数的通量来表示：

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} F_{ij}^{\text{mass}}\mathrm{d}t = \int_{t^n}^{t^{n+1}}\int_{-\infty}^{+\infty} u_nf_{ij}(t)\mathrm{d}\vec{u}\mathrm{d}\xi\mathrm{d}t = \int_{t^n}^{t^{n+1}}\sum_k\omega_k\int_{-\infty}^{+\infty}u_{n,k}f_{ij,k}(t)\mathrm{d}\xi\mathrm{d}t = \sum_k\omega_k\int_{t^n}^{t^{n+1}}F_{ij,k}^h\mathrm{d}t$$

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \vec{F}_{ij}^{\text{momentum}}\mathrm{d}t = \int_{t^n}^{t^{n+1}}\int_{-\infty}^{+\infty} u_n\vec{u}f_{ij}(t)\mathrm{d}\vec{u}\mathrm{d}\xi\mathrm{d}t = \int_{t^n}^{t^{n+1}}\sum_k\omega_k\int_{-\infty}^{+\infty}u_{n,k}\vec{u}_kf_{ij,k}(t)\mathrm{d}\xi\mathrm{d}t = \sum_k\omega_k\vec{u}_k\int_{t^n}^{t^{n+1}}F_{ij,k}^h\mathrm{d}t$$

$$\begin{aligned} \int_{t^n}^{t^{n+1}} F_{ij}^{\text{energy}}\mathrm{d}t &= \int_{t^n}^{t^{n+1}}\int_{-\infty}^{+\infty} u_n\frac{1}{2}(|\vec{u}|^2+\xi^2)f_{ij}(t)\mathrm{d}\vec{u}\mathrm{d}\xi\mathrm{d}t = \int_{t^n}^{t^{n+1}}\sum_k\omega_k\int_{-\infty}^{+\infty}u_{n,k}\frac{1}{2}(|\vec{u}_k|^2+\xi^2)f_{ij,k}(t)\mathrm{d}\xi\mathrm{d}t \\ &= \sum_k\omega_k\frac{1}{2}|\vec{u}_k|^2\int_{t^n}^{t^{n+1}}F_{ij,k}^h\mathrm{d}t + \sum_k\omega_k\frac{1}{2}\int_{t^n}^{t^{n+1}}F_{ij,k}^b\mathrm{d}t \end{aligned}$$

根据以上内容，我们可以得到如下的一、二维流动的 UGKS 计算流程：在 $t=t^n$ 时，根据已知的宏观场量 ρ_i^n 、$\vec{U}_i^n$ 和 T_i^n ，可以得到 $\lambda_i^n=\frac{1}{2RT_i^n}$ 。然后，基于给定的速度空间离散方法与离散数目可以确定离散速度空间 $\vec{u}_k$ 以及相应的积分权重系数 ω_k 。并且，根据 CFL 条件可以确定时间步长：

$$\Delta t=\mathrm{CFL}\frac{\Delta x}{|U^n|+c}$$

这里上标 n 表示第 n 时间级，Δx 是当地网格等效尺度，c 是声速。这里的 $\mu(T_i^n)$ 根据所选定的粒子模型来确定。

根据已知的宏观量场来初始化各离散速度气体分布函数，一般而言可以直接使用 Maxwell 分布进行初始化：

$$\begin{aligned}
h_{i,k}^n&=H_{i,k}^n=\rho_i^n\left(\frac{\lambda_i^n}{\pi}\right)^{D/2}e^{-\lambda_i^n|\vec{u}_k-\vec{U}_i^n|^2}\\
b_{i,k}^n&=B_{i,k}^n=\frac{3-D}{2\lambda_i^n}H_{i,k}^n
\end{aligned}$$

同时对一些宏观量以及 Shakhov 模型修正项进行初始化：

$$\begin{aligned}
p_i^n&=\frac{1}{3}\sum_k\omega_k\left(|\vec{u}_k-\vec{U}_i^n|^2h_{i,k}^n+b_{i,k}^n\right)\\
\vec{q}_i^n&=\frac{1}{2}\sum_k\omega_k(\vec{u}_k-\vec{U}_i^n)\left(|\vec{u}_k-\vec{U}_i^n|^2h_{i,k}^n+b_{i,k}^n\right)\\
\tau_i^n&=\frac{\mu(T_i^n)}{p_i^n}\\
H_{i,k}^{+(n)}&=H_{i,k}^n\frac{1-\mathrm{Pr}}{5p_i^nRT_i^n}(\vec{u}_k-\vec{U}_i^n)\cdot\vec{q}_i^n\left(\frac{|\vec{u}_k-\vec{U}_i^n|^2}{RT_i^n}-2-D\right)\\
B_{i,k}^{+(n)}&=B_{i,k}^n\frac{1-\mathrm{Pr}}{5p_i^nRT_i^n}(\vec{u}_k-\vec{U}_i^n)\cdot\vec{q}_i^n\left(\frac{|\vec{u}_k-\vec{U}_i^n|^2}{RT_i^n}-D\right)
\end{aligned}$$

初始化完成后，使用限制器或 WENO 等其他插值方法对网格界面处的分布函数进行重构，分别得到 $h_{ij,k}$ 、$b_{ij,k}$ 和 $\sigma_{ij,k}^h$ 、$\sigma_{ij,k}^b$ ，其中

$$h_{ij,k}=h_{ij,k}^{L,n}H[u_{n,k}]+h_{ij,k}^{R,n}(1-H[u_{n,k}]),\quad b_{ij,k}=b_{ij,k}^{L,n}H[u_{n,k}]+b_{ij,k}^{R,n}(1-H[u_{n,k}])$$

$$\sigma_{ij,k}^h=\sigma_{i,k}^hH[u_{n,k}]+\sigma_{j,k}^h(1-H[u_{n,k}]),\quad \sigma_{ij,k}^b=\sigma_{i,k}^bH[u_{n,k}]+\sigma_{j,k}^b(1-H[u_{n,k}])$$

其中 $u_{n,k}=\vec{u}_k\cdot\vec{n}$ 表示沿网格界面法线方向的由网格 i 指向网格 j 的粒子平动速度分量。

计算网格界面处的守恒宏观量：

$$\begin{aligned}
\rho_{ij}&=\sum_k\omega_kh_{ij,k}\\
(\rho\vec{U})_{ij}&=\sum_k\omega_k\vec{u}_kh_{ij,k}\\
(\rho E)_{ij}&=\sum_k\frac{1}{2}\omega_k\left(|\vec{u}_k|^2h_{ij,k}+b_{ij,k}\right)
\end{aligned}$$

同时基于这些守恒宏观量计算网格界面处的 λ_{ij} 、温度、压力、热通量和粒子碰撞时间：

$$\begin{aligned}
\lambda_{ij}&=\frac{3}{4(E_{ij}-\frac{1}{2}|\vec{U}_{ij}|^2)}\\
T_{ij}&=\frac{1}{2R\lambda_{ij}}\\
p_{ij}&=\frac{1}{3}\sum_k\omega_k\left(|\vec{u}_k-\vec{U}_{ij}^n|^2h_{ij,k}+b_{ij,k}\right)\\
\vec{q}_{ij}&=\frac{1}{2}\sum_k\omega_k(\vec{u}_k-\vec{U}_{ij}^n)\left(|\vec{u}_k-\vec{U}_{ij}^n|^2h_{ij,k}+b_{ij,k}\right)\\
\tau_{ij}&=\frac{\mu(T_{ij})}{p_{ij}}
\end{aligned}$$

计算网格界面处的 Maxwell 分布与 Shakhov 模型修正项：

$$
\begin{aligned}
H_{ij,k} &= \rho_{ij}\left(\frac{\lambda_{ij}}{\pi}\right)^{D/2} e^{-\lambda|\vec{u}_k-\vec{U}_{ij}|^2} \\
B_{ij,k} &= \frac{3-D}{\lambda_{ij}} H_{ij,k} \\
H^+_{ij,k} &= H_{ij,k}\frac{1-\mathrm{Pr}}{5p_{ij}RT_{ij}}(\vec{u}_k-\vec{U}_{ij})\cdot\vec{q}_{ij}\left(\frac{|\vec{u}_k-\vec{U}_{ij}|^2}{RT_{ij}}-2-D\right) \\
B^+_{ij,k} &= B_{ij,k}\frac{1-\mathrm{Pr}}{5p_{ij}RT_{ij}}(\vec{u}_k-\vec{U}_{ij})\cdot\vec{q}_{ij}\left(\frac{|\vec{u}_k-\vec{U}_{ij}|^2}{RT_{ij}}-D\right)
\end{aligned}
$$

计算网格界面处 Maxwell 分布的空间梯度和时间梯度系数 $a_{ij,1}$ 、$\vec{a}_{ij,24}$ 、$a_{ij,5}$ 与 $A_{ij,1}$ 、$\vec{A}_{ij,24}$ 、$A_{ij,5}$ ，其中

$$
\begin{aligned}
a_{ij,1} &= a^L_{ij,1}H[u_{n,k}] + a^R_{ij,1}(1-H[u_{n,k}]) \\
\vec{a}_{ij,24} &= \vec{a}^L_{ij,24}H[u_{n,k}] + \vec{a}^R_{ij,24}(1-H[u_{n,k}]) \\
a_{ij,5} &= a^L_{ij,5}H[u_{n,k}] + a^R_{ij,5}(1-H[u_{n,k}])
\end{aligned}
$$

计算 5 个时间系数，并进而计算分布函数的通量 $\int_{t^n}^{t^{n+1}} F^h_{ij,k}\mathrm{d}t$ 与 $\int_{t^n}^{t^{n+1}} F^b_{ij,k}\mathrm{d}t$ ，同时据此得到守恒宏观量的通量 $\int_{t^n}^{t^{n+1}} F^{\text{mass}}_{ij}\mathrm{d}t$ 、$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \vec{F}^{\text{momentum}}_{ij}\mathrm{d}t$ 与 $\int_{t^n}^{t^{n+1}} F^{\text{energy}}_{ij}\mathrm{d}t$ 。于是可以计算下一个时间级的守恒宏观量：

$$
\begin{aligned}
\rho_i^{n+1} &= \rho_i^n - \frac{1}{\Omega_i}\sum_{j\in N(i)} S_{ij}\int_{t^n}^{t^{n+1}} F^{\text{mass}}_{ij}\mathrm{d}t \\
(\rho\vec{U})_i^{n+1} &= (\rho\vec{U})_i^n - \frac{1}{\Omega_i}\sum_{j\in N(i)} S_{ij}\int_{t^n}^{t^{n+1}} \vec{F}^{\text{momentum}}_{ij}\mathrm{d}t \\
(\rho E)_i^{n+1} &= (\rho E)_i^n - \frac{1}{\Omega_i}\sum_{j\in N(i)} S_{ij}\int_{t^n}^{t^{n+1}} F^{\text{energy}}_{ij}\mathrm{d}t
\end{aligned}
$$

由这些守恒宏观量可以计算出下一个时间级的部分宏观量以及 Maxwell 分布：

$$
\begin{aligned}
\lambda_i^{n+1} &= \frac{3}{4(E_i^{n+1}-\frac{1}{2}|\vec{U}_i^{n+1}|^2)} \\
T_i^{n+1} &= \frac{1}{2R\lambda_i^{n+1}} \\
H^{n+1}_{i,k} &= \rho_i^{n+1}\left(\frac{\lambda_i^{n+1}}{\pi}\right)^{D/2} e^{-\lambda_i^{n+1}|\vec{u}_k-\vec{U}_i^{n+1}|^2} \\
B^{n+1}_{i,k} &= \frac{3-D}{2\lambda_i^{n+1}} H^{n+1}_{i,k}
\end{aligned}
$$

接着先按照矩形估计的碰撞项计算出中间更新态分布函数：

$$
\begin{aligned}
h^*_{i,k} &= h^n_{i,k} - \frac{1}{\Omega_i}\sum_{j\in N(i)} S_{ij}\int_{t^n}^{t^{n+1}} F^h_{ij,k}\mathrm{d}t + \Delta t\frac{H^n_{i,k}+H^{+(n)}_{i,k}-h^n_{i,k}}{\tau_i^n} \\
b^*_{i,k} &= b^n_{i,k} - \frac{1}{\Omega_i}\sum_{j\in N(i)} S_{ij}\int_{t^n}^{t^{n+1}} F^b_{ij,k}\mathrm{d}t + \Delta t\frac{B^n_{i,k}+B^{+(n)}_{i,k}-b^n_{i,k}}{\tau_i^n}
\end{aligned}
$$

而利用该中间更新态分布函数可以计算出中间更新态宏观量，并据此计算中间更新态 Shakhov 模型修正项：

$$
\begin{aligned}
p_i^* &= \frac{1}{3}\sum_k \omega_k \big(|\vec{u}_k - \vec{U}_i^{n+1}|^2 h_{i,k}^* + b_{i,k}^*\big) \\
\vec{q}_i^* &= \frac{1}{2}\sum_k \omega_k (\vec{u}_k - \vec{U}_i^{n+1})\big(|\vec{u}_k - \vec{U}_i^{n+1}|^2 h_{i,k}^* + b_{i,k}^*\big) \\
\tau_i^* &= \frac{\mu(T_i^{n+1})}{p_i^*} \\
H_{i,k}^{+(*)} &= H_{i,k}^{n+1}\frac{1-\mathrm{Pr}}{5p_i^* RT_i^{n+1}}(\vec{u}_k - \vec{U}_i^{n+1})\cdot\vec{q}_i^*\Big(\frac{|\vec{u}_k - \vec{U}_i^{n+1}|^2}{RT_i^{n+1}} - 2 - D\Big) \\
B_{i,k}^{+(*)} &= B_{i,k}^{n+1}\frac{1-\mathrm{Pr}}{5p_i^* RT_i^{n+1}}(\vec{u}_k - \vec{U}_i^{n+1})\cdot\vec{q}_i^*\Big(\frac{|\vec{u}_k - \vec{U}_i^{n+1}|^2}{RT_i^{n+1}} - D\Big)
\end{aligned}
$$

进而可以计算出最终更新的气体分布函数：

$$
\begin{aligned}
h_{i,k}^{n+1} &= \Big(1+\frac{\Delta t}{2\tau_i^*}\Big)^{-1}\Big[h_{i,k}^n - \frac{1}{\Omega_i}\sum_{j\in N(i)} S_{ij}\int_{t^n}^{t^{n+1}} F_{ij,k}^h \mathrm{d}t + \frac{\Delta t}{2}\Big(\frac{H_{i,k}^{n+1}+H_{i,k}^{+(*)}}{\tau_i^*} + \frac{H_{i,k}^n - h_{i,k}^n}{\tau_i^n}\Big)\Big] \\
b_{i,k}^{n+1} &= \Big(1+\frac{\Delta t}{2\tau_i^*}\Big)^{-1}\Big[b_{i,k}^n - \frac{1}{\Omega_i}\sum_{j\in N(i)} S_{ij}\int_{t^n}^{t^{n+1}} F_{ij,k}^b \mathrm{d}t + \frac{\Delta t}{2}\Big(\frac{B_{i,k}^{n+1}+B_{i,k}^{+(*)}}{\tau_i^*} + \frac{B_{i,k}^n - b_{i,k}^n}{\tau_i^n}\Big)\Big]
\end{aligned}
$$

由此也可以计算出最终更新的宏观量与 Shakhov 模型修正项：

$$
\begin{aligned}
p_i^{n+1} &= \frac{1}{3}\sum_k \omega_k \big(|\vec{u}_k - \vec{U}_i^{n+1}|^2 h_{i,k}^{n+1} + b_{i,k}^{n+1}\big) \\
\vec{q}_i^{n+1} &= \frac{1}{2}\sum_k \omega_k (\vec{u}_k - \vec{U}_i^{n+1})\big(|\vec{u}_k - \vec{U}_i^{n+1}|^2 h_{i,k}^{n+1} + b_{i,k}^{n+1}\big) \\
\tau_i^{n+1} &= \frac{\mu(T_i^{n+1})}{p_i^{n+1}} \\
H_{i,k}^{+(n+1)} &= H_{i,k}^{n+1}\frac{1-\mathrm{Pr}}{5p_i^{n+1} RT_i^{n+1}}(\vec{u}_k - \vec{U}_i^{n+1})\cdot\vec{q}_i^{n+1}\Big(\frac{|\vec{u}_k - \vec{U}_i^{n+1}|^2}{RT_i^{n+1}} - 2 - D\Big) \\
B_{i,k}^{+(n+1)} &= B_{i,k}^{n+1}\frac{1-\mathrm{Pr}}{5p_i^{n+1} RT_i^{n+1}}(\vec{u}_k - \vec{U}_i^{n+1})\cdot\vec{q}_i^{n+1}\Big(\frac{|\vec{u}_k - \vec{U}_i^{n+1}|^2}{RT_i^{n+1}} - D\Big)
\end{aligned}
$$

之后又开始进行网格界面处气体分布函数的重构，进行迭代循环。

8.3 多原子气体的 UGKS 方法

8.3.1 完全弛豫的 UGKS-relax

对于完全弛豫的情况，分子的转动和振动被视为内自由度，具有跟平动温度相同的温度。粒子在内自由度的平均速度认为等于零，也就是说，完全弛豫的多原子气体的 Maxwell 分布为

$$
g = \rho\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{\frac{3+K}{2}} e^{-\lambda|\vec{u}-\vec{U}|^2} e^{-\lambda\xi^2}
$$

其中 $\xi^2 = \xi_1^2 + \xi_2^2 + \cdots + \xi_K^2$ 表示具有 K 个内自由度。

与一、二维的单原子 UGKS 方法类似，为了减少计算成本，引入约化分布函数来进行接下来的计算，并且对于一、二维流动，被忽略的维度方向的平动速度在处理时也将等效为内自由度。此时，约化 Maxwell 分布为

$$
H = \int_{-\infty}^{+\infty} g\mathrm{d}\xi = \rho\Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{D/2} e^{-\lambda|\vec{u}-\vec{U}|^2}, \quad B = \int_{-\infty}^{+\infty} \xi^2 g\mathrm{d}\xi = \frac{3-D+K}{2\lambda}H
$$

同样的，这里的 D 表示流动的维度数，且 $\vec{u}$ 与 $\vec{U}$ 在忽略的维度方向上的分量始终为零。相应的约化 g^+ 项则为

$$H^+ = \int_{-\infty}^{+\infty} g^+ \mathrm{d}\xi = H\frac{1-\mathrm{Pr}}{5pRT}(\vec{u}-\vec{U})\cdot\vec{q}\Big(\frac{|\vec{u}-\vec{U}|^2}{RT}-2-D+K\Big)$$

$$B^+ = \int_{-\infty}^{+\infty} \xi^2 g^+ \mathrm{d}\xi = B\frac{1-\mathrm{Pr}}{5pRT}(\vec{u}-\vec{U})\cdot\vec{q}\Big(\frac{|\vec{u}-\vec{U}|^2}{RT}-D+K\Big)$$

其余计算内容几乎与一、二维的单原子 UGKS 方法的计算流程保持一致，只是在计算约化分布函数 b 的通量时涉及的一个系数 $\frac{5-D}{2\lambda_{ij}}$ 需要修改为 $\frac{5-D+K}{2\lambda_{ij}}$ 。

8.4 动理学边界条件

8.4.1 恒温壁面边界

对于完全热适应的Maxwell型等温壁面，在边界处处理为漫反射，其中边界ghost cell侧的分布函数为Maxwell分布。该边界条件在稀薄气体模拟中经常使用，可以自动提供壁面滑移速度。参考文献A comparative study of an asymptotic preserving scheme and unified gas-kinetic scheme in continuum flow limit。首先说明动理学完全漫反射边界条件，设 $\vec{n}$ 是边界处由内部流域指向固体方向的法向矢量，记边界处的来流气体分布函数为 f_{gas} ，它通过内部的气体分布函数的外插值得到。由壁面反射回来的分布函数满足 Maxwell 分布

$$g_w = \rho_w\Big(\frac{1}{2\pi RT_w}\Big)^{3/2} e^{-\frac{1}{2RT_w}(\vec{u}-\vec{U}_w)^2}$$

其中 T_w 和 $\vec{U}_w$ 由壁面边界给定。通过无穿透条件来确定 ρ_w ，即

$$\int\limits_{\vec{n}\cdot(\vec{u}-\vec{U}_w)\geq 0} \vec{n}\cdot(\vec{u}-\vec{U}_w)f_{gas}\mathrm{d}\vec{u} = \int\limits_{\vec{n}\cdot(\vec{u}-\vec{U}_w)<0} \vec{n}\cdot(\vec{u}-\vec{U}_w)g_w\mathrm{d}\vec{u}$$

该边界条件在稀薄气体流域中非常有效，但是它在连续流极限下可能并不能给出很好的结果。在上述Maxwell边界的构建中，Knudsen 层将会被加大，因为它假设了来自气体的粒子直接与固体边界碰撞，而不发生任何分子间的碰撞。此外，在连续流动中，除非网格足够细密到能够解析 Knudsen 层，否则外插值将违反无滑移边界条件。如果将 Maxwell 边界条件改为简单的弹性反射边界条件作为无滑移边界条件，那么在出现速度滑移的稀薄气体流域中就无法正常工作。因此，为了得到在稀薄流动和连续流动中均有效的边界条件，需要为所有 Knudsen 数区域建立一种多尺度边界条件。

这里给出一种多尺度边界条件，其核心在于再次使用当地解析解，即 f_{gas} 被替换为 $f(t)$ ，则

$$\int\limits_0^{\Delta t}\int\limits_{\vec{n}\cdot(\vec{u}-\vec{U}_w)\geq 0} \vec{n}\cdot(\vec{u}-\vec{U}_w)f_{gas}\mathrm{d}\vec{u}\mathrm{d}t = \int\limits_0^{\Delta t}\int\limits_{\vec{n}\cdot(\vec{u}-\vec{U}_w)<0} \vec{n}\cdot(\vec{u}-\vec{U}_w)g_w\mathrm{d}\vec{u}\mathrm{d}t$$

类似的边界条件在辐射输运问题中也被提出。当地解析解中的初始气体分布函数 f_0 仍然通过内部网格的外插值得到，而当地解析解中的平衡态则由无滑移边界条件确定，即

$$T_{i+1/2} = T_w,\quad \vec{U}_{i+1/2} = \vec{U}_w$$

$g_{i+1/2}$ 的压强被设置为与相邻网格中心处的值相同。于是，$g_{i+1/2}$ 的密度可以完全确定为

$$\rho_{i+1/2} = \rho_{gas}T_{gas}/T_w$$

该边界条件仅仅改变了来流分布函数，边界反射的粒子仍满足完全漫反射假设。

于是，边界处的宏观通量可以表示为

$$\vec{F}_w = \sum_{u_{n,k}\geq 0} u_{n,k}\bar{f}_{gas}\vec{\psi}_k\omega_k + \sum_{u_{n,k}<0} u_{n,k}g_{w,k}\vec{\psi}_k\omega_k$$

8.4.2 入流和出流边界

由于涉及的流域范围很大，入流和出流边界也需要覆盖不同的流域。流动可以根据 Mach 数分为超音速流和亚音速流两种，在这两种流动中可以使用黎曼不变量来构建边界处的量。一种简单地实现入流边界条件的方式是使用特征变量法由边界条件确定 ghost cell 的宏观态，并由 ghost cell 中的宏观态初始化相应的 Maxwell 平衡态分布函数。而对于超声速流的出流边界，宏观变量和分布函数需要由内部流域插值得到。具体来说，ghost cell 中的状态满足形式

$$\vec{W}_j = B(\vec{W}_i, \vec{W}_{bc}), \quad f_j = B(f_i, f_{bc})$$

其中 B 表示计算边界状态的算子，$\vec{W}_{bc}$ 和 f_{bc} 是提前给定的边界边界状态。在得到 ghost cell 中的状态后，出流和入流边界的通量就可以按照与内部面相同的方式进行计算。

但是，当 Knudsen 数变大后，Euler 方程和 Navier-Stokes 方程不再成立，导致在稀薄流域中基于黎曼不变量的边界条件是不准确的。因此，参考文献A unified gas kinetic scheme with moving mesh and velocity space adaptation，这里给出一种半经验的边界条件来表示稀薄效应。使用全局 Knudsen 数来构建一个权重函数 $\alpha = e^{-1/\mathrm{Kn}}$ ，均一的来流表示为 $\vec{W}_\infty$ ，而通过黎曼不变量构建的宏观量表示为 $B(\vec{W}_i, \vec{W}_\infty)$ ，则边界处 ghost cell 的宏观量构建为

$$\vec{W}_j = \alpha \vec{W}_\infty + (1-\alpha) B(\vec{W}_i, \vec{W}_\infty)$$

在自由分子流和连续流的两个极限情况下，上述边界条件与传统方式得到的边界条件保持一致。同时，上述表达式给出了两个极限情况的平滑转换，能够给出很好的结果。

第 9 章 统一气体动理学波粒方法

9.1 UGKP 方法

参考文献Unified gas-kinetic wave-particle methods I: Continuum and rarefied gas flow。由于粒子的追踪和相互作用可以被视为一种粒子速度空间自适应的最优策略，随机粒子方法在模拟三维的高速稀薄流动将会有非常高的效率。因此，下面将给出微观模拟粒子的演化过程与宏观守恒变量的演化耦合在一起的 UGKP 方法。

在一个时间步长 Δt 内的粒子演化中，一个粒子将保持自由输运直到它遇见其他粒子并发生碰撞，然后它将继续其移动与后续碰撞过程。在它的第一次碰撞之前，粒子轨迹与特征线是相同的，且粒子保持其初始离散速度。一旦发生了碰撞，粒子速度将发生改变，我们也就无法得到其准确的位置和速度，除非一步一步地追踪其每一次碰撞。进行自由输运的时间 t_f 随着当地的物理性质变化，并且在时间段 $(t_f, \Delta t)$ 内将会发生大量的碰撞，这就指定出不同类型的流动区域。与 UGKS 类似，直接在时间步长 Δt 的尺度对流动物理进行建模是构建一个多尺度格式的关键。

这里我们将对于末端点 $(\vec{x}_e, t_e)$ 的、沿着特征线的积分解析解重写为

$$f(\vec{x}_e, t_e) = (1 - e^{-t_e/\tau}) g(\vec{x}', t') + e^{-t_e/\tau} f_0(\vec{x}_e - \vec{u} t_e) = (1 - e^{-t_e/\tau}) g_p + e^{-t_e/\tau} f_p \tag{9.1}$$

其中

$$\vec{x}' = \vec{u}\Big(\frac{t_e e^{-t_e/\tau}}{1 - e^{-t_e/\tau}} - \tau\Big), \quad t' = \frac{t_e}{1 - e^{-t_e/\tau}} - \tau$$

且 t_e 与数值格式的时间步长有关。点 $(\vec{x}', t')$ 位于特征线上，且随着比值 t_e/τ 的增加而从中点向末端点移动。上式表示，在时间 t_e 的离散分布函数是初始分布函数 f_p 与平衡态 g_p 的泰勒展开的组合。类比确定论方法中的离散分布函数，根据方程 (9.1) 可以通过改变粒子的质量权重来直接演化粒子，而不是其微观速度。但是，这样的处理方式将丢失粒子方法最重要的优势，即速度空间的自适应性质。在方程 (9.1) 中，通过粒子自由输运保持初始分布函数的概率由 $e^{-t/\tau}$ 给出。从统计上讲，每个粒子的自由输运时间可以被确定，因此所有粒子在它们第一次碰撞之前的运动可以被精确地追踪。尽管后续的碰撞与运动过程没有被准确追踪，从系统上的观点来看，根据动理学模型，在当地区域发生碰撞的粒子都将趋近于一个平衡态分布 g_p 。

在有限体积方法的框架下，我们将直接在网格尺度和时间步长尺度对上述物理过程进行建模得到 UGKP 方法。特别地，每个粒子在它们一个时间步内的第一次碰撞前的自由输运过程将被准确地追踪，而碰撞的效果将通过移除这部分粒子并从特定的 Maxwell 分布态重新采样粒子来恢复。为了更好地进行描述，我们将一个时间步内粒子第一次发生碰撞之前的运动称为自由输运过程，第一次发生碰撞之后的运动称为碰撞过程，而一整个时间步的演化过程称为输运过程或多尺度输运过程。作为一种有限体积方法，UGKP 方法在一个时间步内的演化计算将包括

- **宏观层面：**计算数值通量来更新守恒流场变量，包括 (1) 计算粒子自由输运过程贡献的通量；(2) 计算粒子碰撞过程贡献的通量。
- **微观层面：**演化气体分布函数，即更新模拟粒子，包括 (3) 追踪所有粒子在自由输运过程的运动；(4) 在碰撞过程中重新采样碰撞粒子。

9.1.1 自由输运过程

方程 (9.1) 给出粒子自由输运时间的累积分布为

$$G(t) = e^{-t/\tau}$$

所以一个粒子在一个时间步 Δt 的自由输运时间可以确定为

$$t_f = \min\big(-\tau \ln(r_0), \Delta t\big)$$

其中 r_0 是一个从均匀分布区间 $(0,1)$ 中生成的随机数。得到自由输运时间 t_f 后，粒子可以准确地追踪：

$$\vec{x}_p = \vec{x}_p^n + \vec{u}t_f$$

其中粒子的微观速度 $\vec{u}$ 在自由输运过程中保持不变。与 DSMC 方法取 $t_f = \Delta t$ 不同，UGKP 方法的自由输运时间受到粒子碰撞的约束。

在自由输运过程期间，对网格 i 贡献的数值通量可以通过计算通过网格界面的粒子数得到：

$$\vec{W}_i^{fr} = \frac{1}{\Omega_i}\sum_{k\in P(i)}\vec{\phi}_k$$

其中 $P(i)$ 是自由输运过程期间通过网格 i 界面的粒子的集合。向量 $\vec{\phi}_k = (m_p, m_p\vec{u}_k, \frac{1}{2}m_p|\vec{u}_k|^2)$ 表示粒子 k 携带的质量、动量和能量。与 UGKS 中的多尺度输运过程给出的通量进行对比，可以看到上述自由输运过程只恢复了初始分布函数 $f_0(\vec{x})$ 贡献的通量，即有着 q_4 和 q_5 项的 F_{ij}^{fr} 。至此我们已经完成了宏观层面要求的 (1) 与微观层面的 (3) 步。

9.1.2 碰撞过程：宏观通量

在碰撞过程中，粒子发生碰撞后持续移动与碰撞过程，此时，一旦粒子通过了网格界面，它们也会贡献宏观通量。但是，由于我们不是在发展完全粒子追踪方法，粒子在碰撞过程的运动将不会被显式地追踪，所以这部分的宏观通量不能像自由输运过程那样直接地得到。幸运的是，这些通量已经在 UGKS 中给出了，即有着 q_1, q_2 和 q_3 项的 F_{ij}^{eq} 。

因此，碰撞过程通过网格界面 ij 的宏观通量可以由重构的宏观流场变量计算得到：

$$\vec{F}_{ij}^{eq} = \int_0^{\Delta t}\int(\vec{u}\cdot\vec{n}_{ij})f_{ij}^{eq}(t)\vec{\psi}(\vec{u})\mathrm{d}\vec{u}\mathrm{d}t = \int F_{ij}^{eq}\vec{\psi}(\vec{u})\mathrm{d}\vec{u}$$

在 UGKS 中，g_0 根据相容条件通过重构初始分布函数 f_0 来得到。但是，在粒子方法中没有显式的气体分布函数，所以网格界面的分布函数由重构的宏观流场变量得到，即

$$\int g_0\vec{\psi}(\vec{u})\mathrm{d}\vec{u} = \int_{\vec{u}\cdot\vec{n}>0} g^L\vec{\psi}(\vec{u})\mathrm{d}\vec{u} + \int_{\vec{u}\cdot\vec{n}} g^R\vec{\psi}(\vec{u})\mathrm{d}\vec{u}$$

其中 g^L 和 g^R 分别为网格界面左右两侧的平衡态，它们由插值重构的宏观流场变量 $\vec{W}^L$ 和 $\vec{W}^R$ 确定。与 GKS 和 UGKS 相同，$\frac{\partial g}{\partial t}$ 和 $\frac{\partial g}{\partial \vec{x}}$ 可以由宏观流场变量得到，然后平衡态通量 $\vec{F}^{eq}$ 也可以解析地计算出来。

此时，UGKS 中的多尺度通量已经通过自由输运通量 $\vec{W}_i^{fr}$ 和碰撞通量 $\vec{F}^{eq}$ 完全地恢复。宏观流场变量可以根据守恒定律进行更新：

$$\vec{W}^{n+1} = \vec{W}_i^n - \frac{1}{\Omega_i}\sum_{j\in N(i)}\vec{F}_{ij}^{eq}S_{ij} + \vec{W}_i^{fr}$$

至此，我们完成了宏观层面的 (2) 步，并结束了宏观层面的更新。

9.1.3 碰撞过程：微观粒子

在自由输运过程，所有粒子在时间段 $(0, t_f)$ 的详细运动都被追踪。对于 $t_f \geq \Delta t$ 的无碰撞粒子，在当前时间步的微观态更新（包括粒子速度和位置）都已经完成。而对于 $t_f < \Delta t$ 的碰撞粒子，它们每一个在时间段 $(t_f, \Delta t)$ 都至少经历了一次碰撞，并且这些碰撞的总体效果就是迫使当地区域所有的碰撞粒子满足一个特定的平衡态分布 g_p 。根据守恒定律，从更新的宏观流场变量和输运的无碰撞粒子，我们可以很容易地得到时间步末端时的碰撞粒子：

$$\vec{W}_i^h = \vec{W}_i^{n+1} - \vec{W}_i^p$$

其中 $\vec{W}_i^p$ 是当前网格 i 中经过了自由输运过程后的无碰撞粒子所携带的守恒流场变量。因此，在碰撞过程 $(t_f, \Delta t)$ 中，这些碰撞粒子首先会由于粒子碰撞而被移除，然后在每个时间步的结尾由当前相应的宏观流场变量 $\vec{W}_i^h$ 重新采样。从 $\vec{W}_i^h$ 可以确定出一个特定的 Maxwell 分布，根据宏观速度和温度，网格 i 中的碰撞粒子可以被重采样来恢复分布函数。至此，我们已经进行了微观层面的 (4) 步，并且宏观流场变量和微观粒子都已经被更新。

UGKP 方法是一个守恒有限体积方法，其中使用了模拟粒子来恢复重要的非平衡态分布函数。在宏观层面上，守恒变量由满足守恒定律的通量进行更新。在微观层面上，所有粒子在自由输运过程都被准确地追踪，而碰撞过程中的碰撞粒子则根据更新的平衡态进行重新采样。守恒定律的保持是该粒子方法成功的关键。另外需要注意，在自由输运过程中，每个粒子移动一个自由输运时间 t_f 而不是一整个时间步长 Δt ，同时配合上紧随的碰撞过程，就构建出了一个能够恢复 UGKS 多尺度性质的多尺度输运过程。

9.2 UGKWP 方法

参考文献Unified Gas-kinetic Wave-Particle Methods II: Multiscale Simulation on Unstructured Mesh。这里将引入波粒的概念来将 UGKP 方法发展为更高效的 UGKWP 方法。在 UGKP 方法中，气体分布函数完全由模拟粒子表示，并且在碰撞过程中碰撞粒子被移除并由 Maxwell 分布进行重采样。理论上，这一部分气体分布函数可以通过一种解析地方式来表达。气体分布函数可以通过流体动力学波 (hydrodynamic waves) 与离散的动理学粒子复原，它们对应宏观变量 $\vec{W}^h$ 和 $\vec{W}^p$ 。在 UGKP 方法中，对于下一个时间步的演化，重新采样的平衡态粒子将会再次基于自由输运时间 t_f 分类为无碰撞和碰撞两类粒子。在自由输运过程，两类粒子都将贡献自由输运自由输运通量，但是只有无碰撞粒子才会在时间步的末尾保持为粒子来恢复非平衡态气体分布函数。因此，只有流体动力学波中的无碰撞粒子需要在每个时间步的末尾进行重采样，并且这些流体动力学波先前产生的碰撞粒子对下一个时间步输运通量的贡献可以解析地计算。

根据累积分布 $G(t)=e^{-t/\tau}$ ，我们可以容易地得到每个网格单元内无碰撞粒子的期望比例，并且每个时间步末端在流体动力学波 $\vec{W}^h$ 中需要被采样的粒子为

$$\vec{W}^{hp}=\vec{W}^h e^{-\Delta t/\tau}$$

由碰撞粒子 $\vec{W}^h-\vec{W}^{hp}$ 贡献的自由输运通量可以解析地计算为

$$\begin{aligned}\vec{F}^{fr,wave}&=\vec{F}^{fr}_{ugks}(\vec{W}^h)-\vec{F}^{fr}_{dvm}(\vec{w}^{hp})\\&=\int(\vec{u}\cdot\vec{n})\Big[(q_4-\Delta t e^{-\Delta t/\tau})g_0^h+(q_5+\frac{\Delta t^2}{2}e^{-\Delta t/\tau})\vec{u}\cdot\frac{\partial g^h}{\partial\vec{x}}\Big]\vec{\psi}(\vec{u})\mathrm{d}\vec{u}\end{aligned}$$

其中 g_0^h 是由 $\vec{W}^h$ 确定的 Maxwell 分布且 $\frac{\partial g^h}{\partial\vec{x}}$ 是该 Maxwell 分布的空间导数，它可以通过 $\vec{w}^h$ 的重构得到。

因此在 UGKWP 方法中，守恒变量的更新过程将变为

$$\vec{W}_i^{n+1}=\vec{W}_i^n-\frac{1}{\Omega_i}\sum_{j\in N(i)}\vec{F}_{ij}^{eq}S_{ij}-\frac{1}{\Omega_i}\vec{F}_{ij}^{fr,wave}S_{ij}+\vec{W}_i^{fr}$$

与 UGKP 方法中的更新公式对比，项 $\vec{F}_{ij}^{fr,wave}$ 是从粒子自由输运 $\vec{W}_i^{fr}$ 中提取出来的解析部分。上式中的最后两项与 UGKP 更新公式中的最后一项是等价的。

总体而言，UGKWP 方法与 UGKP 方法很类似，区别在于 UGKWP 在模拟中只采样了来自 $e^{-\Delta t/\tau}\vec{W}^h$ 的粒子，并且来自 $\vec{W}^h$ 的自由输运通量由非采样粒子的解析通量 $\vec{F}^{fr,w}$ 以及上述采样粒子的网格粒子流 $\vec{W}^{fr}$ 组成。UGKWP 方法的计算流程总结如下：

1. **输运粒子：** 为每个粒子 P_k 采样自由输运时间 $t_{f,k}$ ，并让粒子 P_k 输运一段 $\min(\Delta t, t_{f,k})$ 的时间。
2. **计算通量：** 由通过网格界面的粒子数计算网格自由输运流 $\vec{W}^{fr}$ ；计算由 $(1-e^{-\Delta t/\tau})\vec{W}^h$ 贡献的解析的自由输运通量 $\vec{F}^{fr,w}$ ；由重构的宏观流场量计算平衡态通量 $\vec{F}^{eq}$ 。
3. **更新守恒变量：** 由上式更新宏观守恒量。计算无碰撞粒子的总守恒量 $\vec{W}^p$ 以及碰撞粒子的守恒量 $\vec{W}^h=\vec{W}-\vec{W}^p$ 。
4. **更新粒子：** 保留无碰撞粒子并移除碰撞粒子。由 $e^{-\Delta t/\tau}\vec{W}^h$ 以及分布 g^+ 重采样粒子。

第 10 章 非线性耦合本构关系模型

为了提供一种可靠并能够稳定计算的高阶流体动力学模型，Eu 从广义流体动力学的基本理论出发并结合非平衡集成方法，提出了一组广义流体动力学方程组 (generalized hydrodynamic equations, GHE)。在建模过程中，Eu 首先通过构造一套指数型非平衡态分布函数，巧妙地将非平衡态到平衡态的熵增特性与宏观非守恒量的耗散过程紧密结合起来。在此基础上，将该指数型分布函数代入 Boltzmann 碰撞项进行建模。最终得到了严格满足热力学熵增定律的广义流体动力学方程组。

然而，该方程组的高度非线性与强耦合性，使其仅限于研究一维线性化问题。为了将 GHE 拓展至实际问题的研究中，Eu 通过提出绝热假设和封闭理论分别对高阶非守恒量的时间导数项和高阶矩的通量项进行简化处理，最终得到了简化的广义流体动力学方程组。Myong 通过忽略简化的广义流体动力学方程组中非守恒量的梯度项与热流和速度梯度的点乘项，建立了非线性耦合本构关系 (nonlinear coupled constitutive relations, NCCR) 模型。相比于传统 NS 方程的线性本构模型，NCCR 方程中应力与热流的表达形式具有高非线性与强耦合性的特征。

10.1 NCCR 方程理论基础

10.1.1 广义速度矩

对于流动问题，通常可以将流场中的宏观物理量分为守恒量和非守恒量，宏观量与微观量的对应关系可以表示为

$$\Phi^{(k)} = \langle h^{(k)} f \rangle$$

其中，角括号表示对气体分子在整个相速度空间的积分，$\Phi^{(k)}$ 代表两组宏观物理量，$h^{(k)}$ 为这些宏观量对应的微观表达式。

对于宏观量，其宏观与微观对应如下：

$$\Phi^{(1)} = \rho, \quad \Phi^{(2)} = \rho\vec{U}, \quad \Phi^{(3)} = \rho e$$

$$h^{(1)} = m, \quad h^{(2)} = m\vec{u}, \quad h^{(3)} = \frac{1}{2}m|\vec{u}|^2 + H_{\mathrm{rot}}$$

其中 $\rho, \vec{U}$ 和 ρe 分别为气体的宏观密度、速度和内能，$m, \vec{u}$ 和 H_{rot} 分别表示粒子的微观质量，速度和转动 Hamilton 算子（仅针对双原子气体）。

非守恒量的宏观与微观定义如下：

$$\Phi^{(4)} = \mathbf{\Pi}, \quad \Phi^{(5)} = \Delta, \quad \Phi^{(6)} = \vec{q}$$

$$h^{(4)} = [m\vec{c}\vec{c}]^{(2)}, \quad h^{(5)} = \frac{1}{2}m|\vec{c}|^2 - p/n, \quad h^{(6)} = \left(\frac{1}{2}m|\vec{c}|^2 + H_{\mathrm{rot}} - \hat{h}m\right)\vec{c}$$

其中，$\mathbf{\Pi}, \Delta, \vec{q}$ 分别表示应力、附加正应力和热流，$\vec{c}, p, n$ 和 $\hat{h}$ 分别表示分子的热运动速度、热力学压力、分子数密度和单位质量的焓密度。数学符号 $[\boldsymbol{A}]^{(2)}$ 表示 2 阶无迹对称张量，其表达形式为

$$[\boldsymbol{A}]^{(2)} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}^T) - \frac{1}{3}\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{A})\boldsymbol{I}$$

其中 $\boldsymbol{I}$ 表示单位张量。

10.1.2 非守恒量的演化方程

为了对非守恒量的演化方程进行建模，同时将非平衡态到平衡态的熵增特性与宏观非守恒量的耗散过程紧密结合起来，Eu 提出了一种指数型非平衡态分布函数。在无外力作用下，单组分气体分子的非平衡态分布函数

表达形式为

$$f = \exp\Big[-\frac{1}{k_BT}\Big(\frac{1}{2}m|\vec{c}|^2 + H_{\text{rot}} + \sum_{k=4}^{\infty} X^{(k)}h^{(k)} - \eta\Big)\Big]$$

其中 T, k_B 分别代表温度和 Boltzmann 常数，η 是归一化因子，$X^{(k)}$ 是与宏观量有关的系数，其表达形式为

$$X^{(4)} = -\Phi^{(4)}/(2p) = -\mathbf{\Pi}/(2p)$$
$$X^{(5)} = -3\Phi^{(5)}/(2p) = -3\Delta/(2p)$$
$$X^{(6)} = -\Phi^{(6)}/(p\hat{h}) = -\vec{q}/(p\hat{h})$$

Eu 基于该非平衡态分布函数，并通过碰撞累积量展开的方式对 Boltzmann 的碰撞项建模。并在此基础上，结合广义速度矩的演化方程，最终得到了非守恒量的演化方程，如下：

$$\rho\frac{\mathrm{D}(\mathbf{\Pi}/\rho)}{\mathrm{D}t} + \nabla\cdot\psi^{(1)} = -2[\mathbf{\Pi}\cdot\nabla\vec{U}]^{(2)} - 2(p+\Delta)[\nabla\vec{U}]^{(2)} - \frac{p}{\mu}\mathbf{\Pi}q(\kappa)$$

$$\rho\frac{\mathrm{D}(\Delta/\rho)}{\mathrm{D}t} + \nabla\cdot\psi^{(2)} = -2\gamma'(\mathbf{\Pi}+\Delta\mathbf{I}):\nabla\vec{U} - \frac{2}{3}\gamma' p\nabla\cdot\vec{U} - \frac{2}{3}\gamma'\frac{p}{\zeta}\Delta q(\kappa)$$

$$\rho\frac{\mathrm{D}(\vec{q}/\rho)}{\mathrm{D}t} + \nabla\cdot\psi^{(3)} + \nabla\cdot\psi^{(p)}:\nabla\vec{U} = -\mathbf{\Pi}\cdot C_p\nabla T - \vec{q}\cdot\nabla\vec{U} - \frac{pC_p}{\lambda}\vec{q}q(\kappa) - (p+\Delta)C_p\nabla T + \nabla\cdot\big[(p+\Delta)\mathbf{I}+\mathbf{\Pi}\big]\cdot\frac{\mathbf{\Pi}+\Delta\mathbf{I}}{\rho}$$

其中 $\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \psi^{(3)}, \psi^{(p)}$ 代表高阶矩；$\gamma' = (5-3\gamma)/2$；$q(\kappa) = \sinh(\kappa)/\kappa$ 是非线性耗散项；$\sinh(\kappa) = (e^{\kappa}-e^{-\kappa})/2$ 是双曲正弦函数，κ 通过 Rayleigh-Onsager 耗散方程给定，其表达形式为

$$\begin{aligned}\kappa &= \frac{(mk_B)^{1/4}}{\sqrt{2}d}\frac{T^{1/4}}{p}\Big(\frac{\mathbf{\Pi}:\mathbf{\Pi}}{2\mu} + \gamma'\frac{\Delta^2}{\mu_b} + \frac{\vec{q}\cdot\vec{q}}{\lambda T}\Big)^{1/2}\\ &= \frac{(m_rk_BT_r)^{1/4}}{2d_r\mu_r^{1/2}}\frac{1}{p}\Big(\mathbf{\Pi}:\mathbf{\Pi} + \frac{2\gamma'}{f_b}\Delta^2 + \frac{2\mu}{\lambda T}\vec{q}\cdot\vec{q}\Big)^{1/2}\\ &= cR\end{aligned}$$

其中引入了无量纲数

$$c = \frac{(m_rk_BT_r)^{1/4}}{2d_r\mu_r^{1/2}},\quad R = \frac{1}{p}\Big(\mathbf{\Pi}:\mathbf{\Pi} + \frac{2\gamma'}{f_b}\Delta^2 + \frac{2\mu}{\lambda T}\vec{q}\cdot\vec{q}\Big)^{1/2}$$

从其表达形式可以看出，κ 是一个非常核心的参数，该无量纲参数综合了与气体相关的物理信息：(1) 与气体属性相关的信息，其中包括分子质量 m 、分子直径 d 、剪切粘性系数 μ 、体积粘性系数 ζ 和热传导系数 λ ；(2) 与流场宏观物理量相关的信息，其中包括温度 T 和压力 p ；(3) 与非守恒量相关的信息，包括剪切应力 $\mathbf{\Pi}$ 、附加体积应力 Δ 和热流 $\vec{q}$ 。

10.1.3 高阶矩封闭与绝热假设

可以看到，上面虽然得到了高阶矩的演化方程，但是广义流体动力学方程组依然是一个有待封闭的系统。因为高阶矩依然没有明确的表达形式，所以为了封闭方程组必须对高阶矩进行建模。Eu 为了封闭上述方程组，提出了一套有别于 Crad 封闭的简单封闭方法，即假设高阶矩为零

$$\psi^{(1)} = \psi^{(2)} = \psi^{(3)} = 0$$

同时，Eu 对高阶矩 $\nabla\cdot\psi^{(p)}:\nabla\vec{U}$ 直接简化为零。不同于 Eu 的封闭理论，Myong 从另一个角度对高阶矩的封闭方法提出了自己的理论。他认为，矩方程系统的封闭过程，需要满足等式左端气体输运项与右端分子碰撞项精度一致。因此，Myong 提出了一套松弛的平衡封闭理论，认为高阶矩的梯度为零，即

$$\nabla\cdot\psi^{(1)} = \nabla\cdot\psi^{(2)} = \nabla\cdot\psi^{(3)} + \varphi^{(p)}:\nabla\vec{U} = 0$$

这样的封闭方式，恰好能够与等式右端具有 2 阶碰撞精度的 $q(\kappa)$ 保持一致。虽然 Eu 与 Myong 对高阶矩的封闭方法有各自不同的看法，但是基于两种封闭理论的简化效果是一致的，即不考虑高阶矩在演化方程中的作用。

除了对高阶矩进行简化处理外，Eu 同时认为守恒变量 $(\rho, \rho\vec{U}, \rho e)$ 和非守恒变量 $(\mathbf{\Pi}, \Delta, \vec{q})$ 的演化过程在不同

的时间尺度上，并认为后者的演化速度远远大于前者。因此，针对定常问题的求解，非守恒量的演化过程可以近似为零。由于绝热假设是基于 Lagrange 体系框架下提出的，因此演化方程组左端的随体导数项 $\frac{\mathrm{D}(\boldsymbol{\Pi}/\rho)}{\mathrm{D}t}$ ，$\frac{\mathrm{D}(\Delta/\rho)}{\mathrm{D}t}$ ，$\frac{\mathrm{D}(\vec{q}/\rho)}{\mathrm{D}t}$ 都可以被忽略。这一假设称为 Eu 的绝热假设。Myong 在 Eu 绝热假设的前提下做出了进一步简化，认为热流演化方程中的两项，$\vec{q}\cdot\nabla\vec{U}$ 和 $\nabla\cdot\left[(p+\Delta)\boldsymbol{I}+\boldsymbol{\Pi}\right]\cdot\frac{\boldsymbol{\Pi}+\Delta\boldsymbol{I}}{\rho}$ 是纯对流项，并可以互相抵消。最终，结合封闭理论、Eu 的绝热假设以及 Myong 的简化方法，广义流体动力学方程组被简化为一个线性代数系统，称为非线性耦合本构关系模型 (NCCR)，那么 NCCR 的表达形式如下：

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\Pi}q(\kappa) &= -2\mu[\nabla\vec{U}]^{(2)} - 2\mu\frac{\Delta}{p}[\nabla\vec{U}]^{(2)} - 2\mu\frac{1}{p}[\boldsymbol{\Pi}\cdot\nabla\vec{U}]^{(2)} \\
\Delta q(\kappa) &= -\zeta\nabla\cdot\vec{U} - 3\zeta\frac{1}{p}(\Delta\mathbf{I}+\boldsymbol{\Pi}):\nabla\vec{U} \\
\vec{q}q(\kappa) &= -\lambda\nabla T - \frac{\Delta}{p}\lambda T\nabla\ln T - \frac{\boldsymbol{\Pi}}{p}\cdot\lambda\nabla T
\end{aligned}
$$

而如果引入 NSF 线化本构关系

$$
\boldsymbol{\Pi}_0 = -2\mu[\nabla\vec{U}]^{(2)},\quad \Delta_0 = -\zeta\nabla\cdot\vec{U},\quad \vec{q}_0 = -\lambda\nabla T
$$

那么 NCCR 可以改写为

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\Pi}q(\kappa) &= (1+\Delta/p)\boldsymbol{\Pi}_0 - \frac{2\mu}{p}[\boldsymbol{\Pi}\cdot\nabla\vec{U}]^{(2)} \\
\Delta q(\kappa) &= \Delta_0 - \frac{3\zeta}{p}(\Delta\mathbf{I}+\boldsymbol{\Pi}):\nabla\vec{U} \\
\vec{q}q(\kappa) &= (1+\Delta/p)\vec{q}_0 + \frac{1}{p}\boldsymbol{\Pi}\cdot\vec{q}_0
\end{aligned}
$$

数值试验表明，Myong 所作的简化方法会削弱对热流分布的预测能力，因此可以将其简化的两项重新加回模型当中，此时模型也被称为 NCCR+ 模型，表达形式则为

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\Pi}q(\kappa) &= (1+\Delta/p)\boldsymbol{\Pi}_0 - \frac{2\mu}{p}[\boldsymbol{\Pi}\cdot\nabla\vec{U}]^{(2)} \\
\Delta q(\kappa) &= \Delta_0 - \frac{3\zeta}{p}(\Delta\mathbf{I}+\boldsymbol{\Pi}):\nabla\vec{U} \\
\vec{q}q(\kappa) &= (1+\Delta/p)\vec{q}_0 + \frac{1}{p}\boldsymbol{\Pi}\cdot\vec{q}_0 - \frac{\lambda}{pC_p}\vec{q}\cdot\nabla\vec{U} + \frac{\lambda}{\rho pC_p}\nabla\cdot\left[(p+\Delta)\mathbf{I}+\boldsymbol{\Pi}\right]\cdot(\boldsymbol{\Pi}+\Delta\mathbf{I})
\end{aligned}
$$

不过，根据文献Multiple solutions of nonlinear coupled constitutive relation model and its rectification in non-equilibrium flow computation，在稀薄效应非常强烈的区域，$q(\kappa)$ 会不停增长而导致计算崩溃，这也表明 NCCR 模型本身并不稳定。实际上，在 Eu 的非平衡态热力学中，$q(\kappa)$ 在物理上表示当分布函数远离平衡态时，熵朝着平衡态的弛豫速度会额外增加。然而，额外的熵弛豫率是有界的，这也解释了为什么 NCCR 模型在 $q(\kappa)$ 非常大或者流动太过稀薄时计算精度和稳定性下降。因此，下面给出一种修正技术：当 $q(\kappa)>2.0$ 时，使用如下的应力张量、附加应力和热流结果

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\Pi} &= \chi\boldsymbol{\Pi}_{\text{NCCR}} + (1-\chi)\boldsymbol{\Pi}_{\text{NS}} \\
\Delta &= \chi\Delta_{\text{NCCR}} + (1-\chi)\Delta_{\text{NS}} \\
\vec{q} &= \chi\vec{q}_{\text{NCCR}} + (1-\chi)\vec{q}_{\text{NS}}
\end{aligned}
$$

其中 $\chi = \big(q(\kappa)-1\big)^{-2}$ 。

10.2 NCCR 模型求解方法

10.2.1 NCCR 的无量纲化处理

首先对 NCCR 模型进行无量纲化处理，引入 NSF 线化本构关系

$$
\boldsymbol{\Pi}_0 = -2\mu[\nabla\vec{U}]^{(2)},\quad \Delta_0 = -\zeta\nabla\cdot\vec{U},\quad \vec{q}_0 = -\lambda\nabla T
$$

那么 NCCR 模型可以改写为

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathbf{\Pi}}{p}q(\kappa) &= \frac{\mathbf{\Pi}_0}{p} + \frac{\Delta}{p}\frac{\mathbf{\Pi}_0}{p} + [\frac{\mathbf{\Pi}}{p}\cdot\frac{-2\mu}{p}\nabla\vec{U}]^{(2)} \\
\frac{\Delta}{p}q(\kappa) &= \frac{\Delta_0}{p} + \frac{3}{2}f_b(\frac{\Delta}{p}\mathbf{I} + \frac{\mathbf{\Pi}}{p}) : (\frac{-2\mu}{p}\nabla\vec{U}) \\
\frac{\vec{q}}{p\sqrt{T/(2\varepsilon)}}q(\kappa) &= (1+\frac{\Delta}{p})\frac{\vec{q}_0}{p\sqrt{T/(2\varepsilon)}} + \frac{\mathbf{\Pi}}{p}\cdot\frac{\vec{q}_0}{p\sqrt{T/(2\varepsilon)}}
\end{aligned}
$$

接下来引入无量纲表示

$$
\hat{\mathbf{\Pi}} = \frac{\mathbf{\Pi}}{p},\quad \hat{\Delta} = \frac{\Delta}{p},\quad \hat{\vec{q}} = \frac{\vec{q}}{p\sqrt{T/(2\varepsilon)}},\quad \hat{\nabla\vec{U}} = \frac{-2\mu}{p}\nabla\vec{U}
$$

其中 $\varepsilon = \frac{\mu}{\lambda}$。于是 NCCR 模型的无量纲表示如下:

$$
\begin{aligned}
\hat{\mathbf{\Pi}}q(\kappa) &= (1+\hat{\Delta})\hat{\mathbf{\Pi}}_0 + [\hat{\mathbf{\Pi}}\cdot\hat{\nabla\vec{U}}]^{(2)} \\
\hat{\Delta}q(\kappa) &= \hat{\Delta}_0 + \frac{3}{2}f_b(\hat{\Delta}\mathbf{I} + \hat{\mathbf{\Pi}}) : \hat{\nabla\vec{U}} \\
\hat{\vec{q}}q(\kappa) &= (1+\hat{\Delta})\hat{\vec{q}}_0 + \hat{\mathbf{\Pi}}\cdot\hat{\vec{q}}_0
\end{aligned}
$$

同时，将参数 κ 改写为

$$
\begin{aligned}
\kappa &= \frac{(mk_B)^{1/4}}{\sqrt{2}d}\frac{T^{1/4}}{p}(\frac{1}{2\mu})^{1/2}\Big(\mathbf{\Pi}:\mathbf{\Pi} + \frac{2\gamma'}{f_b}\Delta^2 + \frac{2\mu}{\lambda T}\vec{q}\cdot\vec{q}\Big)^{1/2} \\
&= \frac{(mk_BT)^{1/4}}{2d\mu^{1/2}}\Big(\hat{\mathbf{\Pi}}:\hat{\mathbf{\Pi}} + \frac{2\gamma'}{f_b}\hat{\Delta}^2 + \hat{\vec{q}}\cdot\hat{\vec{q}}\Big)^{1/2} \\
&= c\hat{R}
\end{aligned}
$$

其中引入了无量纲数

$$
c = \frac{(mk_BT_{\text{ref}})^{1/4}}{2d_{\text{ref}}\mu_{\text{ref}}^{1/2}},\quad \hat{R} = \Big(\hat{\mathbf{\Pi}}:\hat{\mathbf{\Pi}} + \frac{2\gamma'}{f_b}\hat{\Delta}^2 + \hat{\vec{q}}\cdot\hat{\vec{q}}\Big)^{1/2}
$$

10.2.2 无分裂迭代法

参考文献An Undecomposed Hybrid Algorithm for Nonlinear Coupled Constitutive Relations of Rarefied Gas Dynamics。NCCR 模型的无量纲表示可以被改写为 $\vec{x} = G(\vec{x})$ 的形式来进行不动点迭代。该方法并不要求一个非常好的初始估计值，但是其难点在于找到一个满足不动点收敛定理的所有变量的显式表达。在构建这样的迭代表达式之前，我们首先将 NCCR 模型的无量纲表示改写为如下形式:

$$
\begin{aligned}
\hat{\mathbf{\Pi}}:\hat{\mathbf{\Pi}}q(c\hat{R}) &= (1+\hat{\Delta})\hat{\mathbf{\Pi}}:\hat{\mathbf{\Pi}}_0 + \hat{\mathbf{\Pi}}:[\hat{\mathbf{\Pi}}\cdot\hat{\nabla\vec{U}}]^{(2)} \\
\frac{2\gamma'}{f_b}\hat{\Delta}^2q(c\hat{R}) &= \frac{2\gamma'}{f_b}\hat{\Delta}\hat{\Delta}_0 + 3\gamma'\hat{\Delta}(\hat{\Delta}\mathbf{I} + \hat{\mathbf{\Pi}}) : \hat{\nabla\vec{U}} \\
\hat{\vec{q}}\cdot\hat{\vec{q}}q(c\hat{R}) &= (1+\hat{\Delta})\hat{\vec{q}}\cdot\hat{\vec{q}}_0 + \hat{\mathbf{\Pi}}:\hat{\vec{q}}_0\hat{\vec{q}}
\end{aligned}
$$

由于耦合本构方程的计算复杂性，上述方程组必须首先利用 Rayleigh-Onsager 耗散函数整合为一个表达式，也即将上面三个方程相加，于是可以得到

$$
\hat{R}^2q(c\hat{R}) = F
$$

其中

$$
F = (1+\hat{\Delta})\hat{\mathbf{\Pi}}:\hat{\mathbf{\Pi}}_0 + \hat{\mathbf{\Pi}}:[\hat{\mathbf{\Pi}}\cdot\hat{\nabla\vec{U}}]^{(2)} + \frac{2\gamma'}{f_b}\hat{\Delta}\hat{\Delta}_0 + 3\gamma'\hat{\Delta}(\hat{\Delta}\mathbf{I} + \hat{\mathbf{\Pi}}) : \hat{\nabla\vec{U}} + (1+\hat{\Delta})\hat{\vec{q}}\cdot\hat{\vec{q}}_0 + \hat{\mathbf{\Pi}}:\hat{\vec{q}}_0\hat{\vec{q}}
$$

这里将采用下面的简单迭代方法求解上述方程：

$$\hat{R}_n = \left(\hat{\mathbf{\Pi}}_n : \hat{\mathbf{\Pi}}_n + \frac{2\gamma'}{f_b}\hat{\Delta}_n^2 + \hat{\vec{q}}_n \cdot \hat{\vec{q}}_n\right)^{1/2}$$

$$\hat{R}_{n+1} = \frac{1}{c}\sinh^{-1}\left(\frac{cF_n}{\hat{R}_n}\right)$$

$$\hat{\mathbf{\Pi}}_{n+1} = \left((1+\hat{\Delta}_n)\hat{\mathbf{\Pi}}_0 + [\hat{\mathbf{\Pi}}_n \cdot \nabla\hat{\vec{U}}]^{(2)}\right)\frac{\hat{R}_n\hat{R}_{n+1}}{F_n}$$

$$\hat{\Delta}_{n+1} = \left(\hat{\Delta}_0 + \frac{3}{2}f_b(\hat{\Delta}_n\mathbf{I} + \hat{\mathbf{\Pi}}_n) : \nabla\hat{\vec{U}}\right)\frac{\hat{R}_n\hat{R}_{n+1}}{F_n}$$

$$\hat{\vec{q}}_{n+1} = \left((1+\hat{\Delta}_n)\hat{\vec{q}}_0 + \hat{\mathbf{\Pi}}_n \cdot \hat{\vec{q}}_0\right)\frac{\hat{R}_n\hat{R}_{n+1}}{F_n}$$

当 $|\hat{R}_{n+1} - \hat{R}_n| \leq 10^{-5}$ 时认为 NCCR 模型的解达到收敛。上述方程的剪切应力、附加正应力和热通量的初始值取为下述值：

$$\hat{R}_0 = \left(\hat{\mathbf{\Pi}}_0 : \hat{\mathbf{\Pi}}_0 + \frac{2\gamma'}{f_b}\hat{\Delta}_0 + \hat{\vec{q}}_0 \cdot \hat{\vec{q}}_0\right)^{1/2}$$

$$\hat{\mathbf{\Pi}}_1 = \frac{\sinh^{-1}(c\hat{R}_0)}{c\hat{R}_0}\hat{\mathbf{\Pi}}_0$$

$$\hat{\Delta}_1 = \frac{\sinh^{-1}(c\hat{R}_0)}{c\hat{R}_0}\hat{\Delta}_0$$

$$\hat{\vec{q}}_1 = \frac{\sinh^{-1}(c\hat{R}_0)}{c\hat{R}_0}\hat{\vec{q}}_0$$

需要强调的是，单独使用不动点迭代法并不能保证在各种情况下都能达到收敛，必须与下面介绍的牛顿迭代法混合使用。

NCCR 模型的无量纲表示可以简要地记为 $\vec{F}(\vec{x}) = 0$，那么可以考虑一种更一般的迭代方式：

$$\vec{G}(\vec{x}) = \vec{x} - \mathbf{A}(\vec{x})^{-1}\vec{F}(\vec{x})$$

其中函数矩阵 $\mathbf{A}(\vec{x})$ 在 $\vec{G}$ 的不动点处非奇异。在非线性方程组的 Newton 迭代法中，$\mathbf{A}(\vec{x})$ 的一个合适形式是 Jacobi 矩阵 $\mathbf{J}(\vec{x})$。从 $\vec{x}^{(0)}$ 初值开始，迭代过程不断演化推进求解，即

$$\vec{x}^{(k+1)} = \vec{x}^{(k)} - \mathbf{J}(\vec{x}^{(k)})^{-1}\vec{F}(\vec{x}^{(k)})$$

虽然 Newton 迭代法一般具有二阶收敛速度，但是过度依赖于一个充分准确的初值，而且 Jacobi 矩阵必须存在。不仅如此，上式的迭代需要在每一步计算 Jacobi 矩阵的逆矩阵，这将会造成计算量巨大以及计算复杂性增加的缺陷。为了避免对 Jacobi 矩阵直接求逆，上面的迭代过程替换为以下的两步过程进行：首先采用 Gauss 消去法求解线性方程组，以获得每一步的迭代增量

$$\mathbf{J}(\vec{x}^{(k)})\Delta\vec{x} = -\vec{F}(\vec{x}^{(k)})$$

然后在旧时刻的迭代值的基础上用迭代增量获得新的近似值

$$\vec{x}^{(k+1)} = \vec{x}^{(k)} + \Delta\vec{x}$$

当迭代增量满足 $|\Delta\vec{x}| < 10^{-5}$ 时认为整个 NCCR 模型的非线性系统采用 Newton 迭代法计算达到收敛。

需要强调的是，单独使用 Newton 迭代法会展现出更加不稳定的计算收敛属性，因此必须与不动点迭代算法进行结合。

10.2.3 不动点迭代法

在有限体积框架下，我们所需求解的守恒方程为

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\vec{U}) = 0 \\
&\frac{\partial (\rho\vec{U})}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\vec{U}\vec{U} + p\mathbf{I}) + \nabla\cdot(\mathbf{\Pi} + \Delta\mathbf{I}) = \vec{0} \\
&\frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \nabla\cdot\left[(\rho E + p)\vec{U}\right] + \nabla\cdot\left[(\mathbf{\Pi} + \Delta\mathbf{I})\cdot\vec{U} + \vec{q}\right] = 0
\end{aligned}
$$

那么经过有限体积离散之后，对于粘性项部分就需要计算

$$
\nabla\cdot(\mathbf{\Pi} + \Delta\mathbf{I}) = \nabla\cdot\mathbf{\Pi} + \nabla(\Delta) = \sum_f (\mathbf{\Pi}_f\cdot\vec{S}_f) + \sum_f \Delta_f\vec{S}_f
$$

以及[1]

$$
\begin{aligned}
\nabla\cdot\left[(\mathbf{\Pi} + \Delta\mathbf{I})\cdot\vec{U} + \vec{q}\right] &= \nabla\cdot(\mathbf{\Pi}\cdot\vec{U}) + \nabla\cdot(\Delta\vec{U}) + \nabla\cdot\vec{q} \\
&= \sum_f\left[(\mathbf{\Pi}_f\cdot\vec{U}_f)\cdot\vec{S}_f\right] + \sum_f(\Delta_f\vec{U}_f\cdot\vec{S}_f) + \sum_f(\vec{q}_f\cdot\vec{S}_f) \\
&= \sum_f\left[(\mathbf{\Pi}_f\cdot\vec{S}_f)\cdot\vec{U}_f\right] + \sum_f(\Delta_f\vec{U}_f\cdot\vec{S}_f) + \sum_f(\vec{q}_f\cdot\vec{S}_f)
\end{aligned}
$$

也就意味着，在有限体积框架下，我们需要得到 $\mathbf{\Pi}_f\cdot\vec{S}_f$ 、$\Delta_f\vec{S}_f$ 以及 $\vec{q}_f\cdot\vec{S}_f$ 的值。

如果我们用 $\mathbf{\Pi}_0, \Delta_0, \vec{q}_0$ 来估计 κ ，那么 $q(\kappa)$ 在迭代过程中可以视为常量。考虑

$$
\begin{aligned}
&\Delta q(\kappa) = \Delta_0 - \frac{3\zeta}{p}\Delta(\nabla\cdot\vec{U}) - \frac{3\zeta}{p}\mathbf{\Pi}:\nabla\vec{U} = \Delta_0 + \frac{3\Delta_0}{p}\Delta - \frac{3\zeta}{p}\mathbf{\Pi}:\nabla\vec{U} \\
&\Delta\Big(q(\kappa) - 3\Delta_0/p\Big) = \Delta_0 - \frac{3\zeta}{p}\mathbf{\Pi}:\nabla\vec{U} \\
&1 + \Delta/p = 1 + \frac{\Delta_0 - \frac{3\zeta}{p}\mathbf{\Pi}:\nabla\vec{U}}{pq(\kappa) - 3\Delta_0}
\end{aligned}
$$

那么剪切应力的方程则变为

$$
\mathbf{\Pi} = \frac{1}{q(\kappa)}\left[\left(1 + \frac{\Delta_0 - \frac{3\zeta}{p}\mathbf{\Pi}:\nabla\vec{U}}{pq(\kappa) - 3\Delta_0}\right)\mathbf{\Pi}_0 - \frac{2\mu}{p}[\mathbf{\Pi}\cdot\nabla\vec{U}]^{(2)}\right]
$$

引入参数

$$
A = \frac{\Delta_0}{pq(\kappa) - 3\Delta_0}, \quad B = \frac{3\zeta/p}{pq(\kappa) - 3\Delta_0}, \quad C = \frac{\mu}{p}
$$

注意到

$$
\mathbf{\Pi}\cdot\nabla\vec{U} = \begin{pmatrix}
U_x\Pi_{11} + U_y\Pi_{12} + U_z\Pi_{13} & V_x\Pi_{11} + V_y\Pi_{12} + V_z\Pi_{13} & W_x\Pi_{11} + W_y\Pi_{12} + W_z\Pi_{13} \\
U_x\Pi_{12} + U_y\Pi_{22} + U_z\Pi_{23} & V_x\Pi_{12} + V_y\Pi_{22} + V_z\Pi_{23} & W_x\Pi_{12} + W_y\Pi_{22} + W_z\Pi_{23} \\
U_x\Pi_{13} + U_y\Pi_{23} + U_z\Pi_{33} & V_x\Pi_{13} + V_y\Pi_{23} + V_z\Pi_{33} & W_x\Pi_{13} + W_y\Pi_{23} + W_z\Pi_{33}
\end{pmatrix}
$$

$$
\mathrm{tr}(\mathbf{\Pi}\cdot\nabla\vec{U}) = U_x\Pi_{11} + (U_y + V_x)\Pi_{12} + (U_z + W_x)\Pi_{13} + V_y\Pi_{22} + (V_z + W_y)\Pi_{23} + W_z\Pi_{33} = \mathbf{\Pi}:\nabla\vec{U}
$$

那么剪切应力的方程进一步改写为

$$
q(\kappa)\mathbf{\Pi} = \left[1 + A - B(\mathbf{\Pi}:\nabla\vec{U})\right]\mathbf{\Pi}_0 - C\left[\mathbf{\Pi}\cdot\nabla\vec{U} + (\mathbf{\Pi}\cdot\nabla\vec{U})^T - \frac{2}{3}\mathrm{tr}(\mathbf{\Pi}\cdot\nabla\vec{U})\mathbf{I}\right]
$$

[1]这里面 $(\mathbf{\Pi}_f\cdot\vec{U}_f)\cdot\vec{S}_f = (\mathbf{\Pi}_f\cdot\vec{S}_f)\cdot\vec{U}_f$ 这样交换点乘顺序能够成立是因为剪切应力张量是对称张量。

考虑到剪切应力张量的迹恒为零，因此剪切应力张量的方程组可以化简为

$$
\begin{aligned}
\Big(q(\kappa)-2\frac{\Delta_0}{p}\Big)\Pi_{011}=&\Big[q(\kappa)\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)+\frac{3\zeta}{p^2}(U_x-W_z)\Pi_{011}+\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)\frac{\mu}{p}\Big(\frac{4}{3}U_x+\frac{2}{3}W_z\Big)\Big]\Pi_{11}\\
&+\Big[\frac{3\zeta}{p^2}(U_y+V_x)\Pi_{011}+\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)\frac{\mu}{p}\Big(\frac{4}{3}U_y-\frac{2}{3}V_x\Big)\Big]\Pi_{12}\\
&+\Big[\frac{3\zeta}{p^2}(U_z+W_x)\Pi_{011}+\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)\frac{\mu}{p}\Big(\frac{4}{3}U_z-\frac{2}{3}W_x\Big)\Big]\Pi_{13}\\
&+\Big[\frac{3\zeta}{p^2}(V_y-W_z)\Pi_{011}+\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)\frac{\mu}{p}\Big(-\frac{2}{3}V_y+\frac{2}{3}W_z\Big)\Big]\Pi_{22}\\
&+\Big[\frac{3\zeta}{p^2}(V_z+W_y)\Pi_{011}+\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)\frac{\mu}{p}\Big(-\frac{2}{3}V_z-\frac{2}{3}W_y\Big)\Big]\Pi_{23}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\Big(q(\kappa)-2\frac{\Delta_0}{p}\Big)\Pi_{012}=&\Big[\frac{3\zeta}{p^2}(U_x-W_z)\Pi_{012}+\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)\frac{\mu}{p}V_x\Big]\Pi_{11}\\
&+\Big[q(\kappa)\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)+\frac{3\zeta}{p^2}(U_y+V_x)\Pi_{012}+\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)\frac{\mu}{p}(V_y+U_x)\Big]\Pi_{12}\\
&+\Big[\frac{3\zeta}{p^2}(U_z+W_x)\Pi_{012}+\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)\frac{\mu}{p}V_z\Big]\Pi_{13}\\
&+\Big[\frac{3\zeta}{p^2}(V_y-W_z)\Pi_{012}+\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)\frac{\mu}{p}U_y\Big]\Pi_{22}\\
&+\Big[\frac{3\zeta}{p^2}(V_z+W_y)\Pi_{012}+\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)\frac{\mu}{p}U_z\Big]\Pi_{23}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\Big(q(\kappa)-2\frac{\Delta_0}{p}\Big)\Pi_{013}=&\Big[\frac{3\zeta}{p^2}(U_x-W_z)\Pi_{013}+\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)\frac{\mu}{p}(W_x-U_z)\Big]\Pi_{11}\\
&+\Big[\frac{3\zeta}{p^2}(U_y+V_x)\Pi_{013}+\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)\frac{\mu}{p}W_y\Big]\Pi_{12}\\
&+\Big[q(\kappa)\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)+\frac{3\zeta}{p^2}(U_z+W_x)\Pi_{013}+\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)\frac{\mu}{p}(W_z+U_x)\Big]\Pi_{13}\\
&+\Big[\frac{3\zeta}{p^2}(V_y-W_z)\Pi_{013}+\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)\frac{\mu}{p}(-U_z)\Big]\Pi_{22}\\
&+\Big[\frac{3\zeta}{p^2}(V_z+W_y)\Pi_{013}+\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)\frac{\mu}{p}U_y\Big]\Pi_{23}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\Big(q(\kappa)-2\frac{\Delta_0}{p}\Big)\Pi_{022}=&\Big[\frac{3\zeta}{p^2}(U_x-W_z)\Pi_{022}+\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)\frac{\mu}{p}\Big(-\frac{2}{3}U_x+\frac{2}{3}W_z\Big)\Big]\Pi_{11}\\
&+\Big[\frac{3\zeta}{p^2}(U_y+V_x)\Pi_{022}+\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)\frac{\mu}{p}\Big(\frac{4}{3}V_x-\frac{2}{3}U_y\Big)\Big]\Pi_{12}\\
&+\Big[\frac{3\zeta}{p^2}(U_z+W_x)\Pi_{022}+\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)\frac{\mu}{p}\Big(-\frac{2}{3}U_z-\frac{2}{3}W_x\Big)\Big]\Pi_{13}\\
&+\Big[q(\kappa)\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)+\frac{3\zeta}{p^2}(V_y-W_z)\Pi_{022}+\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)\frac{\mu}{p}\Big(\frac{4}{3}V_y+\frac{2}{3}W_z\Big)\Big]\Pi_{22}\\
&+\Big[\frac{3\zeta}{p^2}(V_z+W_y)\Pi_{022}+\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)\frac{\mu}{p}\Big(\frac{4}{3}V_z-\frac{2}{3}W_y\Big)\Big]\Pi_{23}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\Big(q(\kappa)-2\frac{\Delta_0}{p}\Big)\Pi_{023}=&\Big[\frac{3\zeta}{p^2}(U_x-W_z)\Pi_{023}+\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)\frac{\mu}{p}(-V_z)\Big]\Pi_{11}\\
&+\Big[\frac{3\zeta}{p^2}(U_y+V_x)\Pi_{023}+\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)\frac{\mu}{p}W_z\Big]\Pi_{12}\\
&+\Big[\frac{3\zeta}{p^2}(U_z+W_x)\Pi_{023}+\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)\frac{\mu}{p}V_x\Big]\Pi_{13}\\
&+\Big[\frac{3\zeta}{p^2}(V_y-W_z)\Pi_{023}+\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)\frac{\mu}{p}(W_y-V_z)\Big]\Pi_{22}\\
&+\Big[q(\kappa)\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)+\frac{3\zeta}{p^2}(V_z+W_y)\Pi_{023}+\Big(q(\kappa)-3\frac{\Delta_0}{p}\Big)\frac{\mu}{p}(W_z+V_y)\Big]\Pi_{23}
\end{aligned}
$$

如果令 $\hat{\Delta}_0 = \Delta_0/p$ ，并引入系数矩阵

$$\mathbf{C} = \frac{3\zeta}{p^2}\begin{pmatrix} (U_x - W_z)\Pi_{011} & (U_y + V_x)\Pi_{011} & (U_z + W_x)\Pi_{011} & (V_y - W_z)\Pi_{011} & (V_z + W_y)\Pi_{011} \\ (U_x - W_z)\Pi_{012} & (U_y + V_x)\Pi_{012} & (U_z + W_x)\Pi_{012} & (V_y - W_z)\Pi_{012} & (V_z + W_y)\Pi_{012} \\ (U_x - W_z)\Pi_{013} & (U_y + V_x)\Pi_{013} & (U_z + W_x)\Pi_{013} & (V_y - W_z)\Pi_{013} & (V_z + W_y)\Pi_{013} \\ (U_x - W_z)\Pi_{022} & (U_y + V_x)\Pi_{022} & (U_z + W_x)\Pi_{022} & (V_y - W_z)\Pi_{022} & (V_z + W_y)\Pi_{022} \\ (U_x - W_z)\Pi_{023} & (U_y + V_x)\Pi_{023} & (U_z + W_x)\Pi_{023} & (V_y - W_z)\Pi_{023} & (V_z + W_y)\Pi_{023} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{S} = \frac{\mu}{p}\begin{pmatrix} \frac{4}{3}U_x + \frac{2}{3}W_z & \frac{4}{3}U_y - \frac{2}{3}V_x & \frac{4}{3}U_z - \frac{2}{3}W_x & -\frac{2}{3}V_y + \frac{2}{3}W_z & -\frac{2}{3}V_z - \frac{2}{3}W_y \\ V_x & V_y + U_x & V_z & U_y & U_z \\ W_x - U_z & W_y & W_z + U_x & -U_z & U_y \\ -\frac{2}{3}U_x + \frac{2}{3}W_z & \frac{4}{3}V_x - \frac{2}{3}U_y & -\frac{2}{3}U_z - \frac{2}{3}W_x & \frac{4}{3}V_y + \frac{2}{3}W_z & \frac{4}{3}V_z - \frac{2}{3}W_y \\ -V_z & W_z & V_x & W_y - V_z & W_z + V_y \end{pmatrix}$$

那么剪切应力方程可以表述为更加简洁的形式：

$$\left[q(\kappa)\big(q(\kappa) - 3\hat{\Delta}_0\big)\mathbf{I} + \mathbf{C} + \big(q(\kappa) - 3\hat{\Delta}_0\big)\mathbf{S}\right]\mathbf{\Pi} = \big(q(\kappa) - 2\hat{\Delta}_0\big)\mathbf{\Pi}_0$$

对于没有附加体积应力的单原子气体，上式可以进一步化简为

$$\left[q(\kappa)\mathbf{I} + \mathbf{S}\right]\mathbf{\Pi} = \mathbf{\Pi}_0$$

通过合适的 $q(\kappa)$ 求解出 $\mathbf{\Pi}$ 之后，就可以显式地求解出附加应力和热流：

$$\Delta = \frac{\Delta_0 - \frac{3\zeta}{p}\mathbf{\Pi} : \nabla\vec{U}}{q - 3\Delta_0/p}, \quad \vec{Q} = \frac{1}{q}\left((1 + \Delta/p)\vec{Q}_0 + \frac{1}{p}\mathbf{\Pi}\cdot\vec{Q}_0\right)$$

考虑不动点的形式 $\Delta q = F(q)$ ，当 NCCR 方程收敛时会有 $\Delta q = 0$ 。根据连续物理过程的思想，满足物理要求的收敛点应该位于最大奇异点的右侧，也是最大的收敛点。为了比较稳定且高效地找到该收敛点，使用 DAFP 方法来求解 NCCR 方程，该方法一方面利用应力张量方程的系数矩阵的行列式来帮助迭代，另一方面使用了 Δq 的信息来加速收敛。