

计算流体力学期末大作业

朱林-2200011028

2025 年 6 月 19 日

1 数理算法原理

1.1 问题描述

1.1.1 物理情形

Sod 激波管问题是一个一维理想气体流动问题：无限长管道中，初始时刻 ($t = 0$) 在 $x = 0$ 处有一薄膜分隔两侧气体：

- 左侧 ($x < 0$): 高压区，状态为 (ρ_L, u_L, p_L)
- 右侧 ($x > 0$): 低压区，状态为 (ρ_R, u_R, p_R)

薄膜在 $t = 0^+$ 时刻瞬时破裂，两侧气体开始相互作用，产生复杂的波系结构。

1.1.2 标准初始条件

采用以下无量纲初始条件：

左侧: $\rho_L = 1.0, u_L = 0.0, p_L = 1.0$

右侧: $\rho_R = 0.125, u_R = 0.0, p_R = 0.1$

1.2 控制方程

流动由一维欧拉方程描述：

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial f(\mathbf{U})}{\partial x} = 0 \quad (1)$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ E \end{bmatrix}, \quad f(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(E + p) \end{bmatrix} \quad (2)$$

其中总能密度 $E = \rho e = \rho(C_v T + \frac{1}{2}u^2)$ 。

1.3 Riemann 问题精确解

1.3.1 波系结构

根据空气动力学知识，该 Sod 激波管中可能出现三种波：

- 激波：流体密度、速度、压力均发生突变，满足 Rankine-Hugoniot (R-H) 关系式。

- 接触间断：流体仅密度发生突变，速度与压力不变。
- 膨胀波（稀疏波）：一种等熵波，其内部物理量连续、光滑，头、尾物理量连续但导数不连续（弱间断），且 Riemann 不变量不变。

对于一维 sod 激波管问题，薄膜破裂后将形成向左传播的膨胀波、向右传播的接触间断和激波，如图1。这些波将流场划分为五个特征区域（如图2所示¹）：

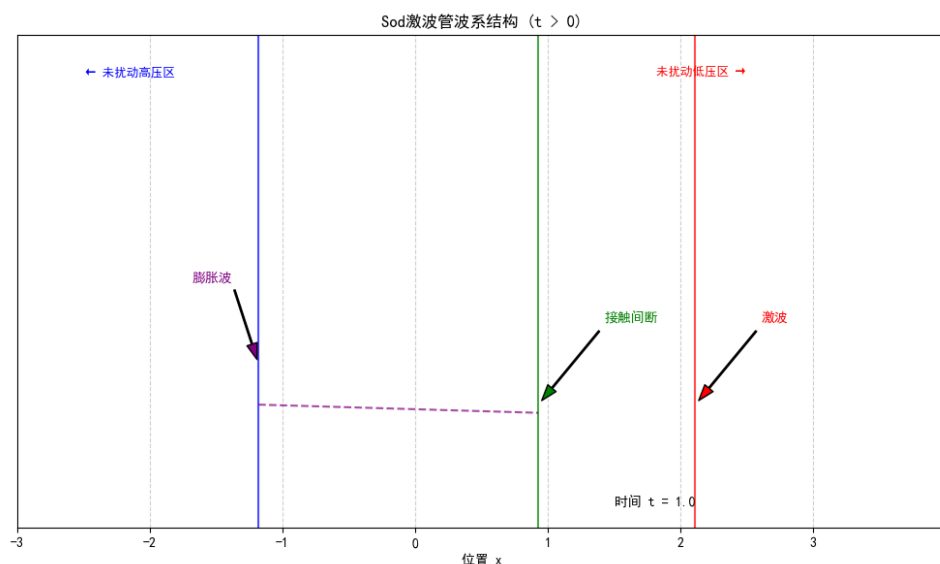


图 1: Sod 激波管典型波系结构 ($t > 0$)

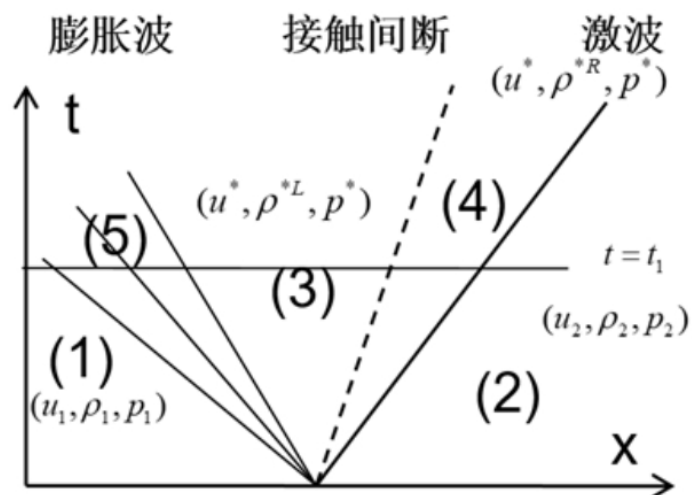


图 2: Sod 激波管典型波系结构

- 区域 1 未扰动的左侧高压区，保持初始状态 (ρ_L, u_L, p_L)
- 区域 2 未扰动的右侧低压区，保持初始状态 (ρ_R, u_R, p_R)

¹url:<https://blog.csdn.net/Nidebear/article/details/109300513>

- **区域 3** 膨胀波后, 状态为 (ρ_2, u^*, p^*)
- **区域 4** 接触间断与激波间均匀区, 状态为 (ρ_3, u^*, p^*)
- **区域 5** 膨胀波内部

其中 u^* 和 p^* 为接触间断处的速度和压力, 各波位置随时间线性变化:

$$x_{\text{left}} = -c_L t, \quad x_{\text{contact}} = u^* t, \quad x_{\text{shock}} = W_s t$$

W_s 为激波传播速度, $c_L = \sqrt{\gamma p_L / \rho_L}$ 为左侧声速。

1.3.2 解析解表达式

解析解通过求解以下方程组获得:

1-3 两区, 等熵关系式

$$\frac{p^*}{(\rho^* L)^\gamma} = \frac{p_1}{(\rho_1)^\gamma} \quad (3)$$

$$u_1 + \frac{2c_1}{\gamma - 1} = u^* + \frac{2c^L}{\gamma - 1} \quad (4)$$

其中, $c^L = \sqrt{\gamma p^* / \rho^{*L}}$ 。

2-4 两区, 激波 R-H 关系式

$$\begin{cases} \rho_2 (u_2 - Z_2) = \rho^{*R} (u^* - Z_2) \\ \rho_2 u_2 (u_2 - Z_2) + p_2 = \rho^{*R} u^* (u^* - Z_2) + p^* \\ E_2 (u_2 - Z_2) + u_2 p_2 = E^{*R} (u^* - Z_2) + p^* u^* \end{cases} \quad (5)$$

以上变量说明从略。综上 5 个方程、5 个未知数, 故方程组可解, 求解方法为联立以上两个方程组, 解出 3、4 区内速度对压力的依赖关系, 有

$$u^* = u_1 - f(p^*, p_1, \rho_1)$$

其中, 满足

$$f(p^*, p_i, \rho_i) = \frac{2c_i}{\gamma - 1} \left[\left(\frac{p^*}{p_i} \right)^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} - 1 \right] \quad (6)$$

注意到, 激波、膨胀波前后速度-压力的依赖关系可写成统一的形式:

左波 (激波或膨胀波)

$$u^* = u_1 - f(p^*, p_1, \rho_1)$$

右波 (激波或膨胀波)

$$u^* = u_2 + f(p^*, p_2, \rho_2)$$

以上 u^*, p^* 表示 3、4 区内的速度与压力, 其中

$$f(p^*, p_i, \rho_i) = \begin{cases} \frac{p^* - p_i}{\rho_i c_i \left[\frac{\gamma+1}{2\gamma} \left(\frac{p^*}{p_i} \right) + \frac{\gamma-1}{2\gamma} \right]^{1/2}}, & p^* > p_i \\ \frac{2c_i}{\gamma-1} \left[\left(\frac{p^*}{p_i} \right)^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} - 1 \right], & p^* < p_i \end{cases} \quad (7)$$

求解上式可得到 3、4 区内的压力, 然后可以解得速度和密度。

膨胀波内部 对于膨胀波内部物理量的计算, 首先由波头传播速度 $u_1 - c_1$ 与波尾传播速度 $u^* - c^{*L}$ 可计算膨胀波的范围。在膨胀波区内, 利用特征相容关系和等熵关系计算物理量, 可利用简单波的特性来简化计算。以下直接给出各个物理量的计算表达式:

$$\begin{aligned} c(t, x) &= \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \left(u_1 - \frac{x}{t} \right) + \frac{2}{\gamma + 1} c_1 \\ u(x, t) &= c + x/t \\ p &= p_1 (c/c_1)^{2\gamma/\gamma-1} \\ \rho &= \gamma p / c^2 \end{aligned}$$

综上所述, 一维 Riemann 问题的精确解的求解思路与方程介绍完毕。本文 Sod 激波管参考精确解程序来自于 GitLab 上的项目 simple shock tube calculator [1]。

1.4 数值计算方法

1.4.1 计算域与网格

计算域默认设置为 $x \in [-5, 5]$, 时间计算域为 $t \in [0, 2.0]$, 该范围足以捕捉 Sod 问题中激波、接触间断和膨胀波的完整演化过程。空间离散采用均匀网格划分, 网格间距 Δx 由计算域长度和网格数动态确定。时间步长 Δt 根据 CFL 条件自适应调整:

$$\Delta t = \text{CFL} \cdot \frac{\Delta x}{\max(|u| + c)} \quad (8)$$

边界条件采用无反射处理:

$$\begin{aligned} U_0 &= U_1 \\ U_{N+1} &= U_N \end{aligned}$$

此边界处理可有效抑制数值反射, 确保波系在计算域内自由传播。网格收敛性研究表明, 接触间断分辨率对网格依赖性显著, 需足够细密的网格才能准确捕捉密度突变特征。

1.4.2 激波捕捉格式

TVD 格式 (Minmod 限制器) 总变差定义:

$$TV(U^n) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} |U_{i+1}^n - U_i^n| \quad (9)$$

TVD 条件:

$$TV(U^{n+1}) \leq TV(U^n) \quad (10)$$

通量限制器格式:

$$F_{i+\frac{1}{2}} = F_i + \frac{1}{2} \phi(r_i) (F_{i+1} - F_i) \quad (11)$$

梯度比:

$$r_i = \frac{U_i - U_{i-1}}{U_{i+1} - U_i} \quad (12)$$

Minmod 限制器函数:

$$\phi(r) = \text{minmod}(1, r) = \begin{cases} 0 & r \leq 0 \\ r & 0 < r < 1 \\ 1 & r \geq 1 \end{cases} \quad (13)$$

性质:

- 满足二阶精度条件: $\phi(1) = 1$
- 满足 TVD 条件: $0 \leq \phi(r) \leq \min(2, 2r)$
- 在间断处退化为单调的一阶格式

群速度控制 (GVC) 格式 通量修正方程:

$$\mathbf{F}^{GVC} = \mathbf{F}^{base} + \epsilon \Delta x^3 \frac{\partial^3 \mathbf{U}}{\partial x^3} \quad (14)$$

三阶导数离散:

$$\left. \frac{\partial^3 U}{\partial x^3} \right|_i \approx \frac{-U_{i-2} + 2U_{i-1} - 2U_{i+1} + U_{i+2}}{2\Delta x^3} \quad (15)$$

自适应控制系数:

$$\epsilon = C \cdot |u \pm c|, \quad C \in [0.1, 0.5] \quad (16)$$

修正后群速度:

$$v_g^{num} = v_g^{exact} - 4\epsilon k^2 \Delta x^2 \quad (17)$$

WENO 格式 基本框架

1. 选择模板: $S_0 = \{I_{i-2}, I_{i-1}, I_i\}$, $S_1 = \{I_{i-1}, I_i, I_{i+1}\}$, $S_2 = \{I_i, I_{i+1}, I_{i+2}\}$
2. 重构多项式:

$$p_0(x) = \frac{1}{3}U_{i-2} - \frac{7}{6}U_{i-1} + \frac{11}{6}U_i \quad (18)$$

$$p_1(x) = -\frac{1}{6}U_{i-1} + \frac{5}{6}U_i + \frac{1}{3}U_{i+1} \quad (19)$$

$$p_2(x) = \frac{1}{3}U_i + \frac{5}{6}U_{i+1} - \frac{1}{6}U_{i+2} \quad (20)$$

WENO-JS 光滑指示器:

$$\beta_k = \sum_{l=1}^2 \Delta x^{2l-1} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left(\frac{d^l p_k(x)}{dx^l} \right)^2 dx \quad (21)$$

$$\beta_0 = \frac{13}{12}(U_{i-2} - 2U_{i-1} + U_i)^2 + \frac{1}{4}(U_{i-2} - 4U_{i-1} + 3U_i)^2 \quad (22)$$

$$\beta_1 = \frac{13}{12}(U_{i-1} - 2U_i + U_{i+1})^2 + \frac{1}{4}(U_{i-1} - U_{i+1})^2 \quad (23)$$

$$\beta_2 = \frac{13}{12}(U_i - 2U_{i+1} + U_{i+2})^2 + \frac{1}{4}(3U_i - 4U_{i+1} + U_{i+2})^2 \quad (24)$$

非线性权重:

$$\alpha_k = \frac{d_k}{(\beta_k + \varepsilon)^p}, \quad \omega_k = \frac{\alpha_k}{\sum_{m=0}^2 \alpha_m} \quad (25)$$

$$d_0 = 0.3, \quad d_1 = 0.6, \quad d_2 = 0.1 \quad (26)$$

$$\varepsilon = 10^{-6}, \quad p = 2 \quad (27)$$

WENO-Z

改进权重:

$$\tau_5 = |\beta_0 - \beta_2| \quad (28)$$

$$\alpha_k^Z = d_k \left(1 + \frac{\tau_5}{\beta_k + \varepsilon} \right) \quad (29)$$

$$\omega_k^Z = \frac{\alpha_k^Z}{\sum_{m=0}^2 \alpha_m^Z} \quad (30)$$

优势: 光滑区 $\omega_k \rightarrow d_k$, 收敛阶 $\mathcal{O}(\Delta x^5)$

1.4.3 通量处理方法

通量矢量分裂 (FVS) Steger-Warming 分裂

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^+ + \mathbf{F}^- = \mathbf{R}^+ \mathbf{R}^{-1} \mathbf{U} + \mathbf{R}^- \mathbf{R}^{-1} \mathbf{U} \quad (31)$$

$$\lambda^\pm = \frac{\lambda \pm |\lambda|}{2} \quad (32)$$

一维欧拉方程形式:

$$\mathbf{f}^\pm = \frac{\rho}{2\gamma} \begin{bmatrix} (\gamma-1)\lambda_1^\pm + \lambda_3^\pm + \lambda_5^\pm \\ 2(\gamma-1)\lambda_1^\pm u + \lambda_3^\pm(u+c) + \lambda_5^\pm(u-c) \\ (\gamma-1)\lambda_1^\pm u^2 + \frac{1}{2}\lambda_3^\pm(u+c)^2 + \frac{1}{2}\lambda_5^\pm(u-c)^2 + \frac{3-\gamma}{2(\gamma-1)}(\lambda_3^\pm + \lambda_5^\pm)c^2 \end{bmatrix} \quad (33)$$

Van Leer 分裂

质量通量分裂:

$$(\rho u)^\pm = \pm \frac{\rho c}{4} (M \pm 1)^2, \quad |M| \leq 1 \quad (34)$$

通量函数:

$$\mathbf{F}^\pm = \begin{bmatrix} (\rho u)^\pm \\ (\rho u)^\pm \left[\frac{(\gamma-1)u \pm 2c}{\gamma} \right] \\ (\rho u)^\pm \left[\frac{((\gamma-1)u \pm 2c)^2}{2(\gamma^2-1)} \right] \end{bmatrix} \quad (35)$$

AUSM 分裂

通量分解:

$$\mathbf{F} = \dot{m} + \mathbf{P}, \quad = [1, u, H]^T \quad (36)$$

界面通量:

$$\mathbf{f}_{1/2} = \dot{m}_{1/2} \mathbf{L}/R + \mathbf{P}_{1/2} \quad (37)$$

质量流量:

$$\dot{m}_{1/2} = c_{1/2} \begin{cases} M_{1/2} \rho_L & M_{1/2} > 0 \\ M_{1/2} \rho_R & \text{其他} \end{cases}, \quad M_{1/2} = M_L^+ + M_R^- \quad (38)$$

Lax-Friedrichs 分裂

$$\mathbf{F}^\pm = \frac{1}{2}(\mathbf{F} \pm \alpha \mathbf{U}), \quad \alpha = \max |\lambda_i| \quad (39)$$

通量差分分裂 (FDS) Roe 方法

Roe 平均:

$$\hat{\rho} = \sqrt{\rho_L \rho_R} \quad (40)$$

$$\hat{u} = \frac{\sqrt{\rho_L} u_L + \sqrt{\rho_R} u_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \quad (41)$$

$$\hat{H} = \frac{\sqrt{\rho_L} H_L + \sqrt{\rho_R} H_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \quad (42)$$

通量计算:

$$\mathbf{f}_{1/2} = \frac{1}{2} (\mathbf{F}_L + \mathbf{F}_R) - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 |\hat{\lambda}_k| \hat{\alpha}_k \hat{\mathbf{r}}_k \quad (43)$$

HLL 方法

通量计算:

$$\mathbf{f}_{\text{HLL}} = \begin{cases} \mathbf{f}_L & S_L \geq 0 \\ \frac{S_R \mathbf{f}_L - S_L \mathbf{f}_R + S_L S_R (\mathbf{U}_R - \mathbf{U}_L)}{S_R - S_L} & S_L < 0 < S_R \\ \mathbf{f}_R & S_R \leq 0 \end{cases} \quad (44)$$

波速估计:

$$S_L = \min(u_L - c_L, \tilde{u} - \tilde{c}), \quad S_R = \max(u_R + c_R, \tilde{u} + \tilde{c}) \quad (45)$$

Lax-Wendroff 方法

二阶中心格式:

$$\mathbf{f}_{i+1/2} = \mathbf{f}(\mathbf{u}_{i+1/2}^{\text{LW}}) \quad (46)$$

中间状态:

$$\mathbf{u}_{i+1/2}^{\text{LW}} = \frac{1}{2}(\mathbf{u}_i + \mathbf{u}_{i+1}) - \frac{\Delta t}{2\Delta x}(\mathbf{f}_{i+1} - \mathbf{f}_i) \quad (47)$$

1.4.4 时间推进格式

三阶 Runge-Kutta (SSP-RK3):

$$\mathbf{U}^{(1)} = \mathbf{U}^n + \Delta t \mathcal{L}(\mathbf{U}^n) \quad (48)$$

$$\mathbf{U}^{(2)} = \frac{3}{4} \mathbf{U}^n + \frac{1}{4} [\mathbf{U}^{(1)} + \Delta t \mathcal{L}(\mathbf{U}^{(1)})] \quad (49)$$

$$\mathbf{U}^{n+1} = \frac{1}{3} \mathbf{U}^n + \frac{2}{3} [\mathbf{U}^{(2)} + \Delta t \mathcal{L}(\mathbf{U}^{(2)})] \quad (50)$$

稳定性条件:

$$\text{CFL} = \max(|u| + c) \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1.5 \quad (51)$$

符号说明

符号	物理意义
ρ	密度
u	速度
p	压强
E	总能
c	声速 $c = \sqrt{\gamma p / \rho}$
H	总焓 $H = (E + p) / \rho$
γ	比热比
\mathbf{R}, \mathbf{L}	右/左特征向量矩阵
λ	特征值
Δx	空间步长
Δt	时间步长

2 代码生成与调试

由于本次的代码量大，且要求复杂，所以编写代码的过程中严格遵循模块化思路，在编写之初就按照功能划分了多个模块，分别为：

- **main.py**: 主程序入口，负责整体流程控制
- **config.py**: 配置模块，存储参数设置和初始条件
- **time_integration.py**: 时间积分模块，包含三阶 Runge-Kutta 方法实现
- **utils**: 工具函数库，包含数据处理、可视化、调用精确解、边界条件处理等功能
- **initialization**: 初始条件模块，负责设置初始状态和网格划分
- **flux**: 通量计算模块，包含 FVS、FDS 等格式实现
- **schemes**: 数值格式模块，包含 TVD、WENO 等格式实现

对于每个模块，在编写完成后都进行了单元测试，确保各个模块功能正确。主程序通过调用这些模块实现整体流程控制。测试所用的程序在 **test** 目录下²，包含了对各个模块的单元测试脚本。接下来我将按照编写的顺序对各个模块进行介绍。

2.1 initialization

在初始化模块下，我一共编写两个文件：一个是 **domain_setup.py**，用于设置计算域和网格划分；另一个是 **sod_initial.py**，用于设置初始条件。

在 **test** 目录中的 **initialization_test.py** 中，我对这两个模块进行了单元测试，确保它们能够正确设置计算域和初始条件。

2.2 utils

在工具函数模块下，我编写了 **boundary.py**、**exact_solution.py**、**visualization.py** 三个文件，同时还来自 GitLab[1] 的代码 **gitlab_sod_analytical.py** 也放置于此模块下。其中 **boundary.py** 实现了三种边界条件处理，**exact_solution.py** 在调用 GitLab 上的代码的基础上实现了 Sod 激波管问题的精确解计算，**visualization.py** 实现了结果可视化功能。

在 **test** 目录中的 **boundary_test.py**、**exact_solution_test.py** 和 **visualization_test.py** 中，我对这些工具函数进行了单元测试，确保它们能够正确处理边界条件、计算精确解和可视化结果。

2.3 flux

在通量计算模块下，我编写了 **flux_fvs.py** 和 **flux_fds.py** 两个文件，分别实现了 FVS 和 FDS 格式的通量计算。其中 **flux_fvs.py** 实现了 Steger-Warming、Van Leer、AUSM 和 Lax-Friedrichs 四种通量分裂方法，**flux_fds.py** 实现了 HLL、Roe 和 Lax-Wendroff 三种通量差分分裂方法。但是其中的 Roe 方法存在问题，我在尝试多次后仍然未能解决 bug，所以在择时请勿使用 Roe 方法。

²如果希望运行测试程序，请将其放置到 **src** 目录下

2.4 schemes

在数值格式模块下，我编写了 `tvb.py`、`weno.py` 和 `gvc.py` 三个文件，分别实现了 TVD 格式、WENO 格式和群速度控制格式。其中 `tvb.py` 实现了 Minmod 限制器的 TVD 格式，`weno.py` 实现了 WENO-JS 和 WENO-Z 格式，`gvc.py` 实现了群速度控制格式。

在 `test` 目录中的 `tvb_fvs_rk3_test.py` 中，我对于 TVD、FVS 和 RK3 格式进行了单元测试，确保在这一组合下能够正确计算 Sod 激波管问题的数值解。

在 `test` 目录中的 `weno_test.py` 中，我对 WENO 格式进行了单元测试，确保其能够正确处理 Sod 激波管问题的数值解。

在 `test` 目录中的 `gvc_test.py` 中，我对群速度控制格式进行了单元测试，确保其能够正确处理 Sod 激波管问题的数值解。

在 `test` 目录中的 `fds_test.py` 中，我在使用 TVD 格式的基础上，测试了 FDS 格式的通量计算，确保其能够正确处理 Sod 激波管问题的数值解。

2.5 time_integration.py

在主目录下，我编写了 `time_integration.py`，用于实现三阶 Runge-Kutta 时间积分方法和计算 Δt 。

2.6 config.py

在主目录下，我编写了 `config.py`，用于存储参数设置和初始条件。该文件包含了所有需要的参数，如计算域、网格划分、初始条件等。此外，在这个文件中，用户可以自主选择使用的数值格式和通量计算方法。这样可以方便地进行参数调整和格式切换，而无需修改其他代码。

2.7 main.py

作为项目的主程序入口，`main.py` 负责整体流程控制。它首先导入配置文件中的参数设置，然后调用各个模块实现 Sod 激波管问题的数值计算和可视化。

2.8 使用方法

在项目的 `src` 目录下，用户可以通过以下命令运行主程序：

```
python main.py
```

运行后，程序将自动执行以下步骤：

1. 导入配置文件中的参数设置
2. 调用初始化模块设置计算域和初始条件
3. 调用工具函数模块处理边界条件和计算精确解
4. 调用通量计算模块计算通量
5. 调用数值格式模块进行数值计算
6. 调用时间积分模块进行时间推进
7. 可视化结果并保存图像文件到 `result` 目录下

```

# 计算域参数
self.nx = 200
self.x_min = -5.0
self.x_max = 5.0
self.t_end = 1.0

# 物理参数
self.gamma = 1.4
self.cv = 1.0

# 数值方法选择
self.scheme = 'tvd' # 激波捕捉格式: 'tvd', 'gvc', 'weno'
self.flux_method = 'fvs' # 通量处理方法: 'fvs', 'fds'
self.flux_type = 'van_leer'
# 具体通量类型:
# FVS: 'steger_warming', 'van_leer', 'ausm', 'lax_friedrichs'
# FDS: 'hll', 'lax_wendroff', 'roe (存在bug)'
self.limiter = 'minmod' # TVD限制器类型
self.weno_variant = 'z' # WENO变体: 'js', 'z'

# 边界条件
self.bc_type = 'non-reflective' # 'non-reflective', 'periodic', 'fixed'
self.num_ghost = 3 # 虚单元层数

```

图 3: config.py 参数设置示例

运行完成后，用户可以在 **result** 目录下找到生成的图像文件，这些图像展示了 Sod 激波管问题的数值解和精确解的对比。如果需要修改参数设置或选择不同的数值格式和通量计算方法，只需编辑 **config.py** 文件即可。

2.9 代码提交信息

在项目开发过程中，我使用了 Git 进行版本控制。以下是一些关键的提交信息

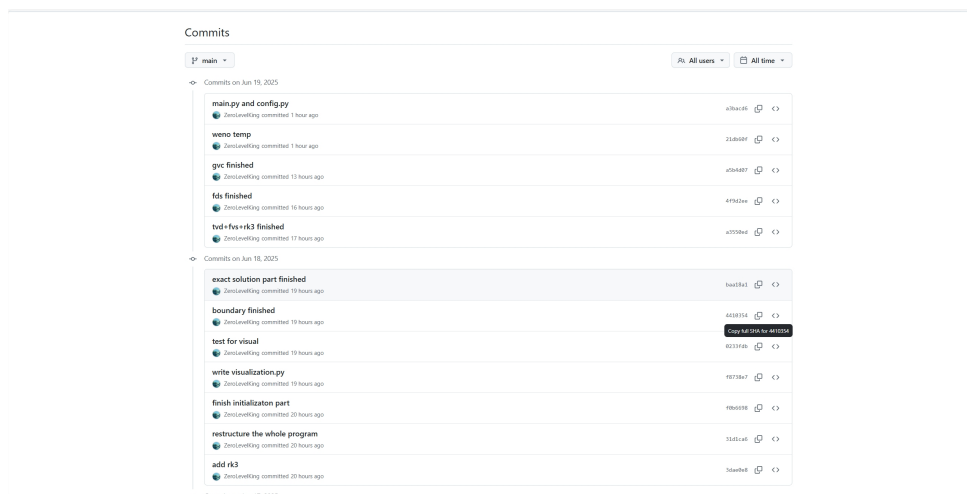


图 4: Git 提交信息示例 1

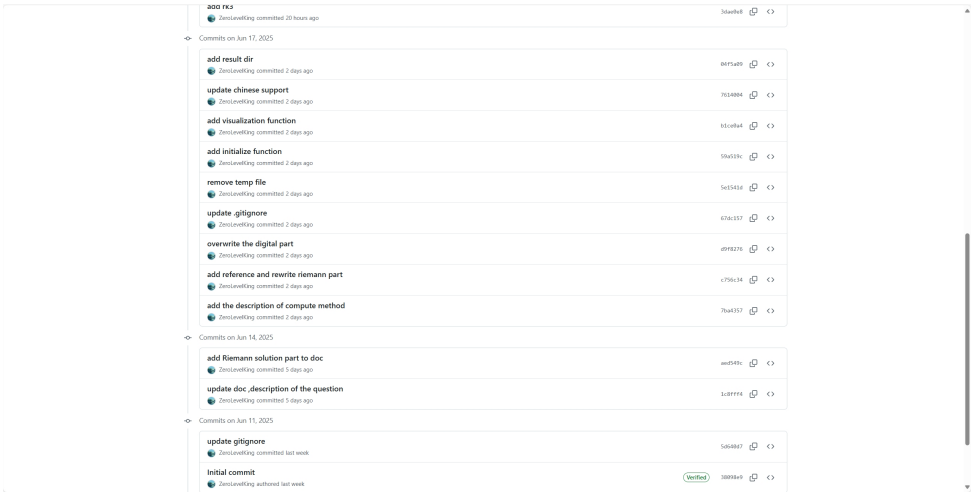


图 5: Git 提交信息示例 2

3 结果讨论和物理解释

AI 工具使用声明表

使用内容	AI 工具用量	使用目的
doc/figure/picture_generate.py	100%	使用 AI 生成文档中所需要的示意性图片
doc/final.tex	20%	省略插入图片和写格式控制语句的重复性工作
ReadMe.md	80%	AI 生成一个框架，在此基础上增加而来
.gitignore	100%	针对于 python 和 latex 的自动生成.gitignore 文件
src/utls/visualization.py	30%	使用 AI 解决了中文显示问题
test/	90%	测试代码，只是调用函数，本身不涉及核心代码，用 AI 生成
src/ 下其余代码	10%	自己编写，用 AI debug 和编写注释

参考文献

- [1] fantaz. Simple shock tube calculator, 2021. Accessed: 2025-06-17. URL: https://gitlab.com/fantaz/simple_shock_tube_calculator.