计算流体力学期末大作业

朱林-2200011028

2025年6月19日

数理算法原理 1

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:

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

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

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

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

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):

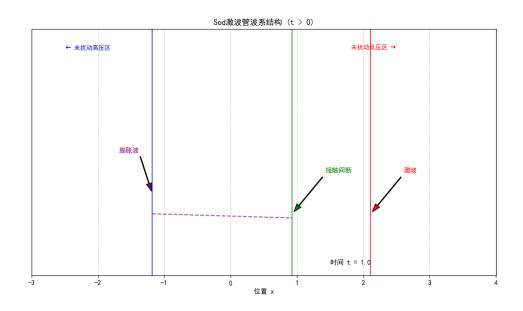


图 1: Sod 激波管典型波系结构(t>0)

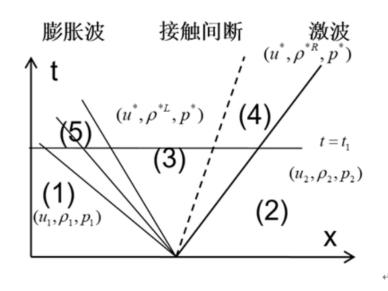


图 2: Sod 激波管典型波系结构

- 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)

 $^{^{1}} url: https://blog.csdn.net/Nidebear/article/details/109300513$

- 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:

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

 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

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

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

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

2-4 两区, 激波 R-H 关系式

$$\begin{cases}
\rho_{2} (u_{2} - Z_{2}) = \rho^{*R} (u^{*} - Z_{2}) \\
\rho_{2} u_{2} (u_{2} - Z_{2}) + p_{2} = \rho^{*R} u^{*} (u^{*} - Z_{2}) + p^{*} \\
E_{2} (u_{2} - Z_{2}) + u_{2} p_{2} = E^{*R} (u^{*} - Z_{2}) + p^{*} u^{*}
\end{cases} (5)$$

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

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

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

$$c(t,x) = \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \left(u_1 - \frac{x}{t} \right) + \frac{2}{\gamma + 1} c_1$$

$$u(x,t) = c + x/t$$

$$p = p_1 \left(\frac{c}{c_1} \right)^{2\gamma/\gamma - 1}$$

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

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:

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

边界条件采用无反射处理:

$$U_0 = U_1$$
$$U_{N+1} = U_N$$

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:

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

$$\tag{9}$$

TVD 条件:

$$TV(U^{n+1}) \le TV(U^n) \tag{10}$$

通量限制器格式:

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

梯度比:

$$r_i = \frac{U_i - U_{i-1}}{U_{i+1} - U_i} \tag{12}$$

Minmod 限制器函数:

$$\phi(r) = \min(1, r) = \begin{cases} 0 & r \le 0 \\ r & 0 < r < 1 \\ 1 & r \ge 1 \end{cases}$$
 (13)

性质:

- 满足二阶精度条件: $\phi(1) = 1$
- 满足 TVD 条件: $0 \le \phi(r) \le \min(2, 2r)$
- 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:

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

三阶导数离散:

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

自适应控制系数:

$$\epsilon = C \cdot |u \pm c|, \quad C \in [0.1, 0.5] \tag{16}$$

修正后群速度:

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

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:

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

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

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

WENO-JS 光滑指示器:

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

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

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

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

非线性权重:

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

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

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

WENO-Z

改进权重:

$$\tau_5 = |\beta_0 - \beta_2| \tag{28}$$

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

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

优势: 光滑区 $\omega_k \to d_k$, 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

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

$$\lambda^{\pm} = \frac{\lambda \pm |\lambda|}{2} \tag{32}$$

一维欧拉方程形式:

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

Van Leer 分裂

质量通量分裂:

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

通量函数:

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

AUSM 分裂

通量分解:

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

界面通量:

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

质量流量:

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

Lax-Friedrichs 分裂

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

通量差分分裂 (FDS) Roe 方法

Roe 平均:

$$\hat{\rho} = \sqrt{\rho_L \rho_R} \tag{40}$$

$$\hat{u} = \frac{\sqrt{\rho_L} u_L + \sqrt{\rho_R} u_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \tag{41}$$

$$\hat{u} = \frac{\sqrt{\rho_L} u_L + \sqrt{\rho_R} u_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}}$$

$$\hat{H} = \frac{\sqrt{\rho_L} H_L + \sqrt{\rho_R} H_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}}$$
(41)

通量计算:

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

HLL 方法

通量计算:

$$\mathbf{f}_{\text{HLL}} = \begin{cases} \mathbf{f}_{L} & S_{L} \ge 0\\ \frac{S_{R}\mathbf{f}_{L} - S_{L}\mathbf{f}_{R} + S_{L}S_{R}(\mathbf{U}_{R} - \mathbf{U}_{L})}{S_{R} - S_{L}} & S_{L} < 0 < S_{R} \\ \mathbf{f}_{R} & S_{R} \le 0 \end{cases}$$

$$(44)$$

波速估计:

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

$$\tag{45}$$

Lax-Wendroff 方法

二阶中心格式:

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

中间状态:

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

$$\tag{47}$$

1.4.4 时间推进格式

三阶 Runge-Kutta (SSP-RK3):

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

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

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

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

稳定性条件:

$$CFL = \max(|u| + c) \frac{\Delta t}{\Delta x} \le 1.5$$
(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 9

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,同时还将来自 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 代码生成与调试 10

2.4 schemes

在数值格式模块下,我编写了 tvd.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 tvd.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 **tvd_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

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

2 代码生成与调试 11

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

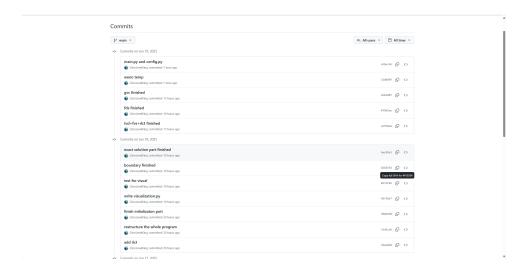


图 4: Git 提交信息示例 1

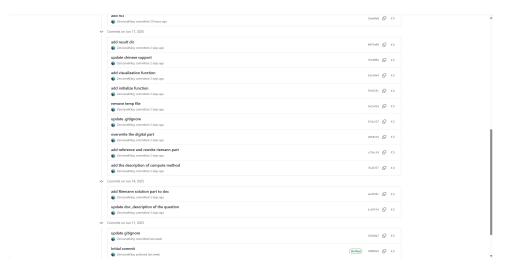


图 5: Git 提交信息示例 2

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/utils/visualization.py	30%	使用 AI 解决了中文显示问题
$\mathrm{test}/$	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 和整理格式

参考文献

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