

计算流体力学大作业报告

廖紫默 (SA21005043)
近代力学系，中国科学技术大学
zimoliao@mail.ustc.edu.cn

2022 年 5 月 30 日

目录

1	Poisson equation	1
1.1	Discretization	1
1.2	Explicit methods	1
1.2.1	Jacobi method	2
1.2.2	Gauss-Seidel (GS) method	2
1.2.3	Successive over-relaxation (SOR) method	2
1.3	Semi-implicit methods	2
1.3.1	TDMA	2
1.3.2	Line successive over-relaxation (LSOR)	3
1.4	Acceleration techniques	3
1.4.1	Multi-grid method	3
1.5	Results and discussion	4
2	Sod shock tube problem	8
2.1	Conservation law and Riemann problem	8
2.2	The Riemann problem for 1D Euler equations	9
2.3	Lax-Wendroff scheme	11
2.4	Shock capturing	11
2.5	Flux vector splitting methods	11
2.5.1	Steger-Warming splitting	12

- 2.5.2 Van Leer splitting 12
- 2.6 Flux difference splitting methods 13
 - 2.6.1 Roe-Pike method 13
- 2.7 High order methods 13
 - 2.7.1 WENO reconstruction 13
 - 2.7.2 Finite volume 1D WENO 17
 - 2.7.3 Finite difference 1D WENO 17
- 2.8 Results and discussion 17

3 2D compression ramp 18

- 3.1 2D Euler/N-S equations in general coordinates 18
- 3.2 Numerical methods 20
 - 3.2.1 Spatial discretization 20
 - 3.2.2 Time advancing 20
 - 3.2.3 Boundary conditions 20
- 3.3 Results and discussion 21

1 Poisson equation

求解 Poisson 方程并绘制等值线 $\phi = (0.05, 0.2, 0.5, 0.75, 1)$:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = \sin x \cos y, \quad 0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1, \quad (1)$$

$$\text{BCs: } \begin{cases} \phi(0, y) = 0, & \phi(1, y) = y - \frac{\sin 1 \cos y}{2}, \\ \phi(x, 0) = -\frac{\sin x}{2}, & \phi(x, 1) = x - \frac{\sin x \cos 1}{2} \end{cases} \quad (2)$$

要求采用方法:

- (1) Jacobi、G-S 选一; SOR、线 SOR、块 SOR 选一。迭代法要求误差 10^{-6} 。
- (2) CG 方法、MG 方法选一。

1.1 Discretization

采用二阶精度的中心差分格式近似二阶导数项:

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i \simeq \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{(\Delta x)^2} \quad (3)$$

Poisson 方程转化为五点离散的代数方程组:

$$A_P \phi_P + A_W \phi_W + A_E \phi_E + A_S \phi_S + A_N \phi_N = Q_P \quad (4)$$

其中 A_K , $K = (P, W, E, S, N)$ 为插值系数, Q_P 为右端项。

1.2 Explicit methods

对于一般的线性代数方程组:

$$A\phi = Q \quad (5)$$

其数值解法通常分为直接方法和迭代方法两大类。虽然前者 (Gauss 消去、LU 分解) 可以直接得到精确解 (计算机精度下), 但在一般的 PDE 问题中, 离散误差远大于计算精度 (Ferziger et al., 2020), 采用低效的直接解法是不明智的选择。由此, 代数方程组 (特别是大型稀疏系统) 的迭代求解方法在 CFD 中取得了广泛应用 (Saad, 2003)。

迭代方法的基本思想在于将式 5 转化为下述迭代方程:

$$M\phi^{n+1} = N\phi^n + B \quad (6)$$

令 $A = M - N$, $B = Q$, 那么当迭代收敛时, $\phi^{n+1} = \phi^n = \phi$, 上式等价于原始方程组。后续介绍的几类迭代方法, 其本质区别就在于 M 、 N 采用不同的构造形式。

1.2.1 Jacobi method

Jacobi 方法将 M 选为系数矩阵 A 的对角部分, N 为非对角部分, 迭代式中 M 的逆可以由对角元素分之一直接得到, 非常容易构造与求解。离散形式的迭代方程为:

$$\phi_P^{n+1} = \frac{Q_P - A_S \phi_S^n - A_W \phi_W^n - A_N \phi_N^n - A_E \phi_E^n}{A_P} \quad (7)$$

若记 $A = L + D + U$, 分别表示其下三角、对角、上三角部分, 那么 Jacobi 方法可以写为矩阵形式 (Sauer, 2018):

$$\phi^{n+1} = D^{-1} [B - (L + U)\phi^n] \quad (8)$$

1.2.2 Gauss-Seidel (GS) method

Gauss-Seidel 方法在 Jacobi 方法的基础上做了细微的优化, 即将每个网格点上迭代更新的值立即用于下一点的迭代。

$$\phi_P^{n+1} = \frac{Q_P - A_S \phi_S^{n+1} - A_W \phi_W^{n+1} - A_N \phi_N^n - A_E \phi_E^n}{A_P} \quad (9)$$

矩阵形式写为 (从左下, 即西南角开始迭代):

$$\phi^{n+1} = D^{-1} (B - U\phi^n - L\phi^{n+1}) \quad (10)$$

1.2.3 Successive over-relaxation (SOR) method

SOR 的思路是在 GS 方法基础上引入超松弛因子 $2 > \omega > 1$ 来加速迭代, 实现快速收敛。

$$\phi_P^{n+1} = \omega \frac{Q_P - A_S \phi_S^{n+1} - A_W \phi_W^{n+1} - A_N \phi_N^n - A_E \phi_E^n}{A_P} + (1 - \omega)\phi_P^n \quad (11)$$

对于椭圆型 PDE, 矩形几何, Dirichlet 边界条件的情况, 可选取 $\omega = 2/[1 + \sin(\pi/N)]$, N 为网格数 (Ferziger et al., 2020; Brazier, 1974)。

1.3 Semi-implicit methods

1.3.1 TDMA

虽然 Gauss 消去与 LU 分解两种直接解法时间复杂度很高, 前者为 $\mathcal{O}(N^3)$ 。但在系数矩阵为三对角矩阵这一特殊情况下, 追赶法, 也称 Thomas 算法、Tridiagonal Matrix Algorithm (TDMA), 可以实现其高效精确求解。考虑如下方程组:

$$A_W^i \phi_{i-1} + A_P^i \phi_i + A_E^i \phi_{i+1} = Q_i \quad (12)$$

首先从上到下消去对角元左侧一列元素：

$$A_P^i = A_P^i - \frac{A_W^i A_E^{i-1}}{A_P^{i-1}}, \quad Q_i^* = Q_i - \frac{A_W^i Q_{i-1}^*}{A_P^{i-1}} \quad (13)$$

随后自下而上回代即可得到精确解：

$$\phi_i = \frac{Q_i^* - A_E^i \phi_{i+1}}{A_P^i} \quad (14)$$

该方法的时间复杂度仅为 $\mathcal{O}(N)$ 。

1.3.2 Line successive over-relaxation (LSOR)

LSOR 方法（包括 LGS）属于 splitting 方法（或称 approximate factorization (AF)，近似因子法）的一种。该类方法的思想在于引入高阶导项，在不影响离散格式阶数的条件下，把原始多维问题（差分算子）拆分为多个一维问题，进而可以在单一维度上采用优化的隐式方法直接求解（如前文所述的 TDMA）。

LSOR 方法在迭代过程中，逐列（行）构造三对角矩阵隐式求解，进而实现加速。以逐列隐式为例（记为 LSOR-Y），在原 SOR 迭代方程中用 ϕ_N^{n+1} 替代 ϕ_N^n ，得到：

$$\phi_P^{n+1} = \omega \frac{Q_P - A_S \phi_S^{n+1} - A_W \phi_W^{n+1} - A_N \phi_N^{n+1} - A_E \phi_E^n}{A_P} + (1 - \omega) \phi_P^n \quad (15)$$

继而转化为三对角矩阵问题：

$$\frac{\omega A_S}{A_P} \phi_S^{n+1} + \phi_P^{n+1} + \frac{\omega A_N}{A_P} \phi_N^{n+1} = \omega \frac{Q_P - A_W \phi_W^{n+1} - A_E \phi_E^n}{A_P} + (1 - \omega) \phi_P^n \quad (16)$$

其中 ϕ_W^{n+1} 为前一列已经计算得到的值，所以右端项均为已知量，该方程采用 TDMA 求解即可。

1.4 Acceleration techniques

1.4.1 Multi-grid method

采用 Fourier 级数对均匀网格上误差方程进行分析，可以发现（相对网格尺寸）：误差的短波分量收敛快、长波分量收敛较慢。一般的迭代方法初始收敛快，对应误差的短波分量快速衰减，而后收敛显著减缓，对应长波分量的缓慢衰减。

基于这一认识，Multi-grid 采用了分而治之的思想，构造多套逐步粗化的网格，在每套网格上利用初始迭代步迅速衰减掉当前网格对应的短波分量，将误差长波分量的

部分交给更粗一级的网格迭代，如此递归下去。实际求解时，由于误差在粗、细网格间传递（restriction、interpolation）时也会引入额外的误差，所以需要重复前述递归过程，直至原始网格上解的精度达到收敛准则。

1.5 Results and discussion

采用前述各类方法编写 C++ 代码求解 Poisson 方程，网格尺寸选取为 128×128 。其中 SOR 与 MG-SOR 方法中 ω 选取为 1.5，MG 方法采用 4 层网格 V 循环，单次 V 循环中每层在向下、向上路径上各迭代 2 次。

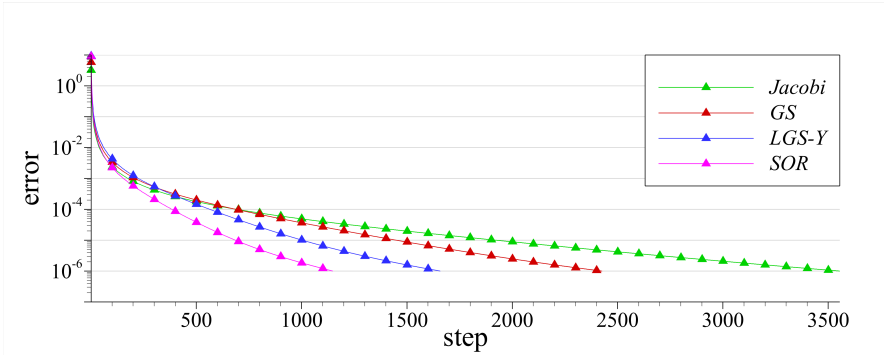
图 2 与图 3 分别展示了 Jacobi、GS、LGS-Y、SOR、MG-GS、MG-SOR 等方法求解前述五点离散 Poisson 方程边值问题的结果与残差分布。图 1 绘制了收敛曲线，其中 Jacobi、GS、LGS-Y、SOR 方法达到 10^{-6} 误差所需步数及计算耗时见表 1。¹

表 1: 各方法求解 Poisson 方程迭代步数与时间。方括号中给出超松弛因子 ω 取Brazier (1974) 的推荐值时 SOR 方法的结果；圆括号中给出了 MG 方法的等价迭代步数

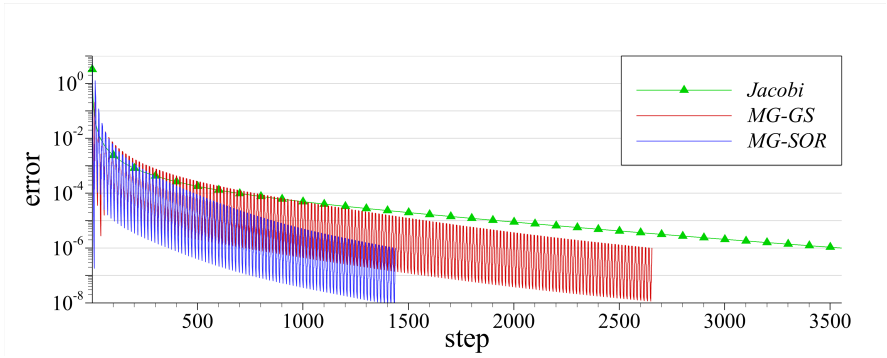
	Jacobi	GS	LGS-Y	SOR	MG-GS	MG-SOR
step	3555	2427	1658	1148 [258]	2656 (876)	1440 (475)
time(s)	1.856	1.167	0.807	0.622 [0.144]	0.541	0.308

对比各方法的测试结果，上表各方法从左至右效率逐渐提高，即达到收敛所需的迭代步数减小、计算时间减小。MG-SOR 方法可以实现 6 倍于 Jacobi 方法的提速。

¹为确保计算时间直接反应不同算法本身的效率（而非计算机底层逻辑优化的结果），编译时未开启自动优化-Ox 选项。事实上，若开启编译优化指令，那么 Jacobi 方法将会显著快于 GS、LGS-Y 等方法，个人认为这是算法本身的可并行性导致的，编译器优化对于 Jacobi 算法会自动开启底层向量化运算，而 GS、SOR、LGS-Y 等方法中每步计算是具有依赖关系的，无法并行。特别的，开启优化后，MG 加速方法仍然有效。



(a) 常规迭代方法



(b) 多重网格加速方法（含粗网格迭代）

图 1: 误差随迭代步的收敛曲线

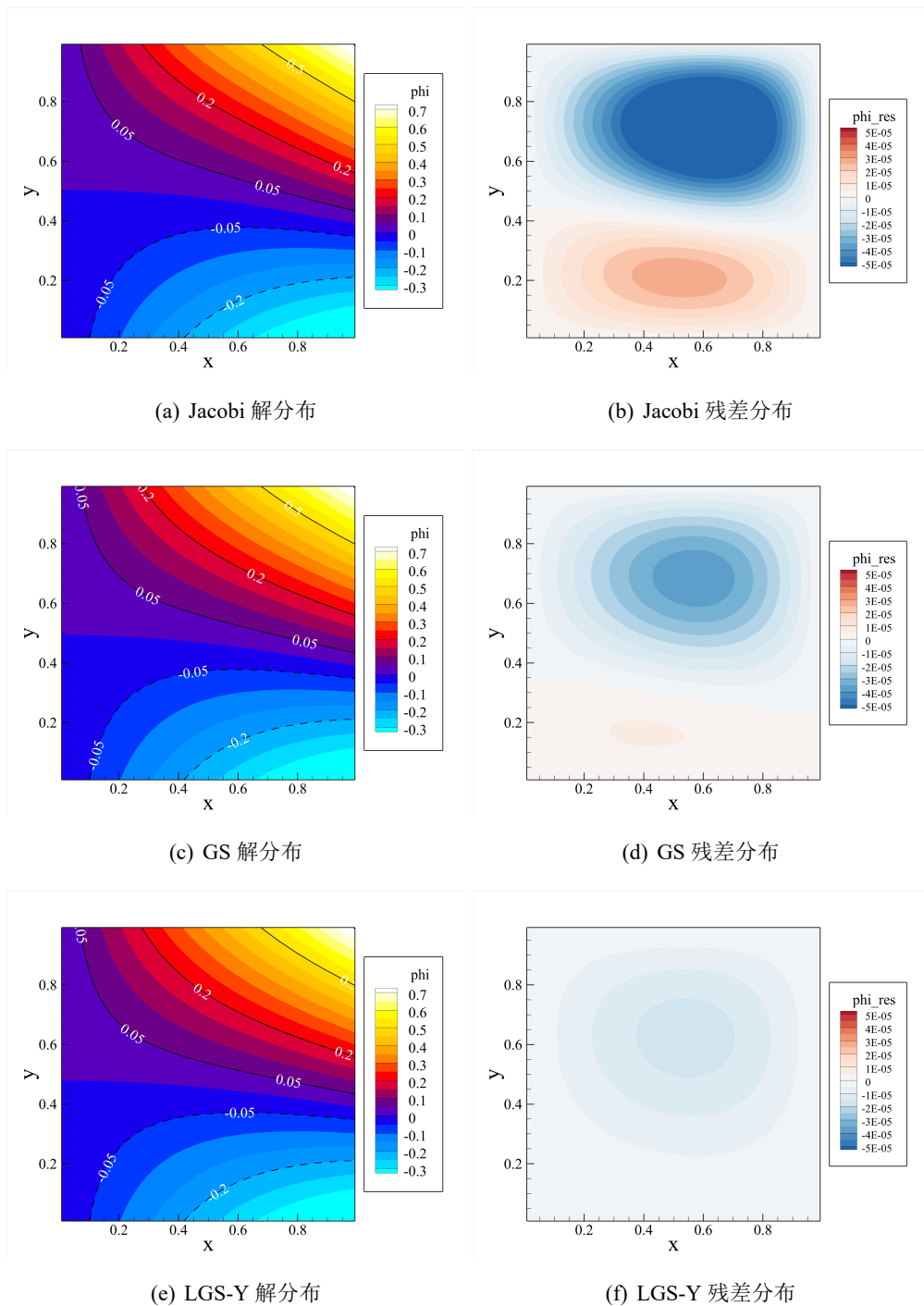


图 2: 各种迭代法求解 Poisson 方程的结果与残差

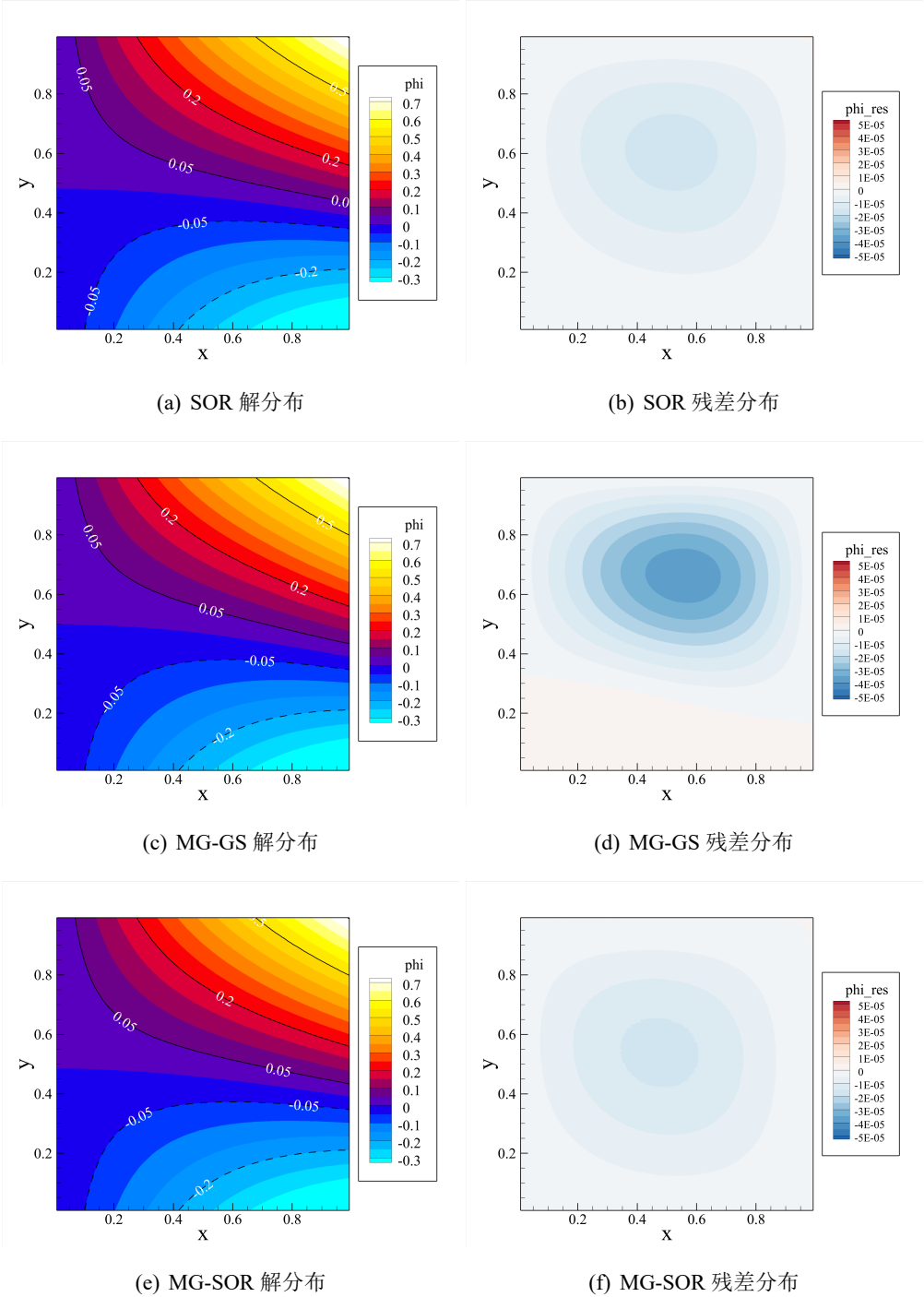


图 3: 各种迭代法求解 Poisson 方程的结果与残差

2 Sod shock tube problem

针对如下 Sod 激波管问题：

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p)}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho E u + p u)}{\partial x} = 0 \end{cases}, \quad x \in [0, 1] \quad (17)$$

$$\text{IC: } (\rho, u, p)|_{t=0} = \begin{cases} (1, 0, 1) & x < 0.5 \\ (0.125, 0, 0.1) & x \geq 0.5 \end{cases} \quad (18)$$

分别采用 Lax-Wendroff 格式、van Leer 格式、Roe 格式、5 阶 WENO 格式计算其数值解。

2.1 Conservation law and Riemann problem

作为激波管问题以及第三题的理论基础，这里简要介绍一维欧拉方程的黎曼问题，主要参考 Toro (2009) 一书。定义守恒律为可写为如下形式的偏微分方程组：

$$\mathbf{U}_t + \mathbf{F}(\mathbf{U})_x = \mathbf{0} \quad (19)$$

其中

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_m \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_m \end{bmatrix} \quad (20)$$

\mathbf{U} 称为守恒变量， $\mathbf{F}(\mathbf{U})$ 称为通量矢量，定义 Jacobian 矩阵为通量函数对守恒变量的偏导（张量） $\mathbf{A}(\mathbf{U}) \equiv \partial \mathbf{F} / \partial \mathbf{U}$ 。若 Jacobian 具有 m 个互不相同的实特征值 λ_i （对应 m 个线性无关的特征向量 $\mathbf{K}^{(i)}$ ），那么该系统被称为双曲守恒律。

一般 $m \times m$ 非线性双曲系统的黎曼问题定义为如下初值问题：

$$\begin{cases} \mathbf{U}_t + \mathbf{F}(\mathbf{U})_x = \mathbf{0} \\ \mathbf{U}(x, 0) = \mathbf{U}^{(0)}(x) = \begin{cases} \mathbf{U}_L & \text{if } x < 0 \\ \mathbf{U}_R & \text{if } x > 0 \end{cases} \end{cases} \quad (21)$$

对于线性系统，黎曼问题的解可以通过叠加原理直接从初值得到。在非线性情况下，根据左右值关系以及特征线方向（特征值），黎曼问题的解由几类基本波（elementary-wave）组成。考虑理想气体的欧拉方程，存在三种基本波：激波、接触间断以及稀疏波（前两者表现为间断，稀疏波表现为由波头、波尾包围的一段连续变化的区域），见图 5。

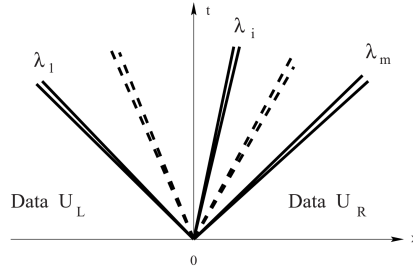


图 4: 黎曼问题解的结构

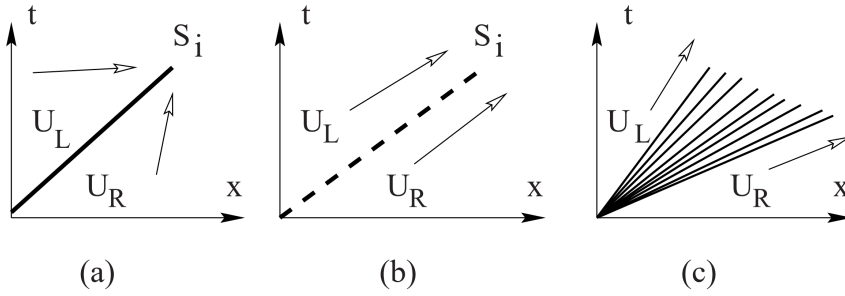


图 5: 一维欧拉方程黎曼问题解的三种基本波类型

2.2 The Riemann problem for 1D Euler equations

考虑一维欧拉方程的守恒形式²:

$$\left. \begin{aligned} U_t + F(U)_x &= 0 \\ U &= \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ E \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(E + p) \end{bmatrix} \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

黎曼问题的初始条件 (间断):

$$U(x, 0) = U^{(0)}(x) = \begin{cases} U_L & \text{if } x < 0 \\ U_R & \text{if } x > 0 \end{cases} \quad (23)$$

上式为欧拉方程的守恒形式, $E = \frac{p}{\gamma-1} + \frac{1}{2}\rho u^2$ 为单位体积总能。

该问题解的一般结构如图 6 所示。通常由左行波、接触间断以及一道右行波组成, 分别对应系统的三个特征值 ($u - a$, u , $u + a$), 其中行波可以是稀疏波和激波两种。两

²这里 E 表示单位体积总能而非比总能, 与题目中的定义不同。

道行波将 $x-t$ 空间划分为三个区域：L 区、* 区和 R 区，其中 * 区进一步被接触间断划分为 *L 和 *R 两部分，*L 和 *R 区速度、压力相同，但密度不同。

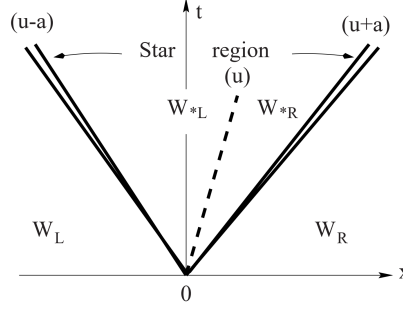


图 6: 一维欧拉方程黎曼问题解的一般形式

一维欧拉方程的黎曼问题精确解由初始间断左右参数 $U_{L,R}$ 唯一确定，其求解思路是先基于左右值判断左右行波类型、得到 * 区参数，随后根据激波、稀疏波关系得到全空间的精确解。* 区压强和速度由下式³给出：

$$f(p, \mathbf{W}_L, \mathbf{W}_R) = f_L(p, \mathbf{W}_L) + f_R(p, \mathbf{W}_R) + \Delta u = 0, \quad \Delta u \equiv u_R - u_L, \quad (24)$$

$$u_* = \frac{1}{2}(u_L + u_R) + \frac{1}{2}[f_R(p_*) - f_L(p_*)] \quad (25)$$

这里 \mathbf{W} 表示原始变量 $(\rho, u, p)^T$ ，上式种压强函数具体形式为：

$$f_L(p_L, \mathbf{W}_L) = \begin{cases} (p - p_L) \left[\frac{A_L}{p + B_L} \right]^{\frac{1}{2}} & \text{if } p > p_L \text{ (shock)} \\ \frac{2a_L}{(\gamma_L - 1)} \left[\left(\frac{p}{p_L} \right)^{\frac{\gamma_L - 1}{2\gamma_L}} - 1 \right] & \text{if } p \leq p_L \text{ (rarefaction)} \end{cases} \quad (26)$$

$$f_R(p_R, \mathbf{W}_R) = \begin{cases} (p - p_R) \left[\frac{A_R}{p + B_R} \right]^{\frac{1}{2}} & \text{if } p > p_R \text{ (shock)} \\ \frac{2a_R}{(\gamma_R - 1)} \left[\left(\frac{p}{p_R} \right)^{\frac{\gamma_R - 1}{2\gamma_R}} - 1 \right] & \text{if } p \leq p_R \text{ (rarefaction)} \end{cases} \quad (27)$$

其中常系数为：

$$\left. \begin{aligned} A_L &= \frac{2}{(\gamma_L + 1)\rho_L}, \quad B_L = \frac{\gamma_L - 1}{\gamma_L + 1}p_L, \\ A_R &= \frac{2}{(\gamma_R + 1)\rho_R}, \quad B_R = \frac{\gamma_R - 1}{\gamma_R + 1}p_R, \end{aligned} \right\} \quad (28)$$

数值上利用 Newton-Raphson 迭代即可求解上述压力方程，该黎曼问题解具有自相似特性，即变量的值仅依赖于 $s \equiv x/t$ ，基于判断得到的左右行波类型，可以由稀疏波、激波关系采样得到各变量在 (x, t) 的值。

³实际上就是稀疏波（等熵流）、激波（Rankine-Hugoniot 条件）的压强匹配关系。

2.3 Lax-Wendroff scheme

Lax-Wendroff 格式是一类具有时/空间两阶精度的双曲型偏微分方程有限差分格式。包含预估、校正的两步 Lax-Wendroff 格式如下所示：

$$\begin{cases} \text{Step 1: prediction} & U_{j+\frac{1}{2}}^* = \frac{1}{2} (U_j^n + U_{j+1}^n) - \frac{\Delta t}{2\Delta x} [F(U_{j+1}^n) - F(U_j^n)] \\ \text{Step 2: correction} & U_j^{n+1} = U_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [F(U_{j+\frac{1}{2}}^*) - F(U_j^*)] \end{cases} \quad (29)$$

2.4 Shock capturing

数值求解非线性双曲型偏微分方程中，最关键的问题就是激波（间断）的捕捉，其中核心思路就是要根据物理上信息传播的方向来确定离散格式的构造，否则会出现非物理振荡，甚至计算发散。目前有两类数值方法可以实现迎风方向（即信息传播方向）的识别：

- (1) 通量矢量分裂，Flux vector splitting (FVS)；
- (2) 通量差分分裂，Flux difference splitting (FDS)，也称 Godunov 类方法。

前者可以看作是有限差分方法中一阶迎风格式的理论拓展，通过双曲守恒律中系数矩阵特征值判断波传播方向，将通量拆分为正负两个方向的部分，分别迎风插值近似。典型通量分裂格式包括 Lax-Friedrichs splitting、Steger-Warming splitting、van Leer splitting、Liou-Steffen splitting（也称 AUSM 格式）。

后者则采取了截然不同的方法论（Godunov 思想，有限体积法），即将已知的变量离散分布，看作其在空间中划分出的控制体上的分片平均，通过求解各控制体边界上的局部黎曼问题，得到全流场的解。局部黎曼问题可以采用精确黎曼求解器求解，但计算量极大且并不会体现出精度优势；更常见的方法是使用近似黎曼求解器，包括近似状态黎曼求解器（假定左右行波类型）、HLL/HLLC 黎曼求解器（基于两波、三波近似）、Roe 黎曼求解器（求解局部线性化问题）等。

2.5 Flux vector splitting methods

对于守恒律，时间上保持连续形式，空间上离散化：

$$\frac{dU_i}{dt} = -\frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{i+\frac{1}{2}} - F_{i-\frac{1}{2}}) \quad (30)$$

其中数值通量拆分为：

$$F_{i+\frac{1}{2}} = F_i^+(U_i^n) + F_{i+1}^-(U_{i+1}^n) \quad (31)$$

分别表示沿 x 正向与负向传播的部分对边界处通量的贡献。分裂通量的具体形式取决于对系数矩阵特征值 $\lambda = \lambda^+ + \lambda^-$ 的分裂方法。记 $\mathbf{\Lambda}^\pm \equiv \text{diag}(\lambda_1^\pm, \dots, \lambda_m^\pm)$, \mathbf{K} 为对应特征向量构成的矩阵, 于是有:

$$\mathbf{F}^\pm = \mathbf{A}^\pm \mathbf{U} = \mathbf{K}^{-1} \mathbf{\Lambda}^\pm \mathbf{K} \mathbf{U} \quad (32)$$

一维欧拉方程系数矩阵特征值为 $(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = (u - a, u, u + a)$, 其中 $a = \sqrt{\gamma p / \rho}$ 为声速。

2.5.1 Steger-Warming splitting

若特征值按如下方式分裂:

$$\lambda_i^+ = \frac{1}{2}(\lambda_i + |\lambda_i|), \quad \lambda_i^- = \frac{1}{2}(\lambda_i - |\lambda_i|) \quad (33)$$

那么可以得到 Steger-Warming 通量矢量分裂格式, 分裂通量为:

$$\mathbf{F}^\pm = \frac{\rho}{2\gamma} \begin{bmatrix} \lambda_1^\pm + 2(\gamma - 1)\lambda_2^\pm + \lambda_3^\pm \\ (u - a)\lambda_1^\pm + 2(\gamma - 1)u\lambda_2^\pm + (u + a)\lambda_3^\pm \\ (H - ua)\lambda_1^\pm + (\gamma - 1)u^2\lambda_2^\pm + (H + ua)\lambda_3^\pm \end{bmatrix} \quad (34)$$

其中 $H = (E + p)/\rho$ 为总比焓。

2.5.2 Van Leer splitting

Van Leer 在构造通量分裂时额外增加了两项条件:

- (1) 分裂 Jacobian 矩阵 $\mathbf{A}^\pm = \frac{\partial \mathbf{F}^\pm}{\partial \mathbf{U}}$ 是连续的;
- (2) 分裂通量可以退化为亚声速流。

其分裂通量为:

$$\mathbf{F}^\pm = \pm \frac{1}{4} \rho a (1 \pm M)^2 \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{2a}{\gamma} \left(\frac{\gamma - 1}{2} M \pm 1 \right) \\ \frac{2a^2}{\gamma^2 - 1} \left(\frac{\gamma - 1}{2} M \pm 1 \right)^2 \end{bmatrix} \quad (35)$$

其中 $M = u/a$ 为马赫数。

2.6 Flux difference splitting methods

2.6.1 Roe-Pike method

不同于近似状态黎曼求解器近似行波类型，HLL/HLLC 黎曼求解器近似解的结构，Roe 方法的思路在于直接将系统方程（非线性双曲守恒律）做线性近似，进而得到边界上通量的表达式（无需判断波的类型或速度），因此 Roe 方法在 CFD 等领域取得了广泛的应用。

原始 Roe 方法需要构造平均 Jacobian 矩阵，事实上该构造过程是没有必要的，Roe, Pike 提出了另一种实现方法，避免了矩阵运算。

2.7 High order methods

前文介绍的方法仅告诉我们如何确定信息传播方向，避免间断附近的非物理振荡，插值过程直接采用一阶精度迎风格式。但在实际可压缩流动数值模拟中，我们还需要通过提高插值格式的阶数来提高离散解的精度，对于存在间断的流场，插值格式也需要特殊的构造以实现“激波捕捉”这一特性。

2.7.1 WENO reconstruction

加权本质无振荡（weighted essentially non-oscillatory, WENO）格式 (Liu et al., 1994) 是在本质无振荡（ENO）格式思想上的进一步拓展，根据子模版上的光滑程度对插值结果加权，而非 ENO 方法中仅保留最光滑的模板。Jiang and Shu (1996) 一文在最初版本 WENO 的基础上提出了一种新的光滑因子计算方法，这一形式的 WENO 格式也称 WENO-JS，在流体力学等领域取得了极为广泛的应用。

接下来我们对 ENO/WENO 方法中最基本的思想和操作步骤简单做一个简单的介绍：

重构 对于双曲守恒律，将离散节点上的值看作单个网格内的平均值（即有限体积思想）

$$\bar{v}_i \equiv \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} v(\xi) d\xi \quad (36)$$

我们通过选取模板（stencil） $S(i) \equiv \{I_{i-r}, \dots, I_{i+s}\}$, $I_i \equiv [x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]$ ，其中 r 表示模板相对 i 节点向左的偏移量。根据模板点上已知的平均值 \bar{v}_{i-r+j} , $j = 0, \dots, k-1$ 做插值，

近似 $v(x)$ 的原函数 (primitive function) 而非其本身:

$$V(x) \equiv \int_{-\infty}^x v(\xi) d\xi \quad (37)$$

进而间接得到 v 在界面 (cell boundary) 处的重构值:

$$v_{i+\frac{1}{2}} = \sum_{j=0}^{k-1} c_{rj} \bar{v}_{i-r+j} \quad (38)$$

对于均匀网格 $\Delta x_i = \Delta x$, 插值系数可由下式求得:

$$c_{rj} = \sum_{m=j+1}^k \frac{\sum_{l=0; l \neq m}^k \prod_{q=0; q \neq m, l}^k (r - q + 1)}{\prod_{l=0; l \neq m}^k (m - l)} \quad (39)$$

下文所述的 ENO、WENO 重构都是基于这一插值重构过程, 主要区别在于模板的选取方法不同。

ENO 重构 我们知道在牛顿插值中, 利用差商 (Divided differences) 的性质, 每增加一个模板点, 仅需在原有多项式基础上增添一项, 便可得到更高一阶的插值多项式 (Sauer, 2018)。另一个关键要素在于, 差商的大小本身可以表征该模板上值的光滑程度 (Cockburn et al., 1998)。

ENO 重构的核心思路就是, 利用牛顿差商的性质, 我们可以从单点模板开始, 逐步从左或右扩展模板, 每次对比左右扩展模板的光滑程度, 选取较光滑的一侧作为高一阶的模板。重复这一模板选取过程, 直至达到我们给定的阶数, 即可获得当前阶数下光滑程度最好的模板 (避开强间断), 用于前述重构过程。

WENO 重构 虽然 ENO 针对双曲守恒律提出了根据光滑程度选取模板的思想, 但容易发现上述实现存在许多缺陷:

1. 在光滑区间, ENO 非必要地舍弃了相对“非光滑”的模板, 造成了精度损失;
2. 数值通量非光滑, 即相邻两点间的模板选取可能有明显区别;
3. 模板选取过程中总共需要考虑 k 个候选模板, 覆盖了 $2k - 1$ 个网格点, 但仅有一个模板被用于最后的重构 k 阶精度;
4. 模板选取过程中存在大量逻辑运算 (if 语句), 对于早期计算机来说比较耗时。

由此, WENO 方法即在 ENO 思想的基础上提出了按模板光滑程度加权的操作, 直接考虑 k 个子模版 (无需像 ENO 一样逐步比较扩展):

$$S_r(i) = \{x_{i-r}, \dots, x_{i-r+k-1}\}, \quad r = 0, \dots, k-1 \quad (40)$$

在每个候选模板上, 都可以得到 $v_{i+\frac{1}{2}}$ 的重构值:

$$v_{i+\frac{1}{2}}^{(r)} = \sum_{j=0}^{k-1} c_{rj} \bar{v}_{i-r+j}, \quad r = 0, \dots, k-1 \quad (41)$$

WENO 采用了上述子模版重构值的凸组合 (convex combination) 作为 $v(x_{i+\frac{1}{2}})$ 的近似:

$$v_{i+\frac{1}{2}} = \sum_{r=0}^{k-1} \omega_r v_{i+\frac{1}{2}}^{(r)} \quad (42)$$

其中权重满足 $\omega_r \geq 0$, $\sum_{r=0}^{k-1} \omega_r = 1$ 。

注意到当所有子模版上函数 $v(x)$ 都光滑的情况下, 存在理想权重 d_r 使得上述重构具有 $2k-1$ 阶精度:

$$v_{i+\frac{1}{2}} = \sum_{r=0}^{k-1} d_r v_{i+\frac{1}{2}}^{(r)} = v(x_{i+\frac{1}{2}}) + \mathcal{O}(\Delta x^{2k-1}) \quad (43)$$

其中 d_r 可以通过对比子模版和全模版 (即 $2k-1$ 点构成的整个模板) 上多项式重构的系数, 求解代数方程组得到。显然, 权函数 ω_r 的设计需要满足在光滑条件下退化为理想权重 d_r , 即 $\omega_r = d_r + \mathcal{O}(\Delta x^{2k-1})$ 。

通过对误差量级的分析以及权函数需满足的稳定性、一致性条件, 可以得到下述表达式:

$$\omega_r = \frac{\alpha_r}{\sum_{s=0}^{k-1} \alpha_s}, \quad r = 0, \dots, k-1 \quad (44)$$

其中:

$$\alpha_r = \frac{d_r}{(\epsilon + \beta_r)^2} \quad (45)$$

Jiang and Shu (1996) 提出了光滑因子 (smooth indicators) β_r 的一种形式 (与基于 L^1 模的总变差定义相近, 但这里是基于 L^2 模):

$$\beta_r = \sum_{l=1}^{k-1} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \Delta x^{2l-1} \left(\frac{\partial^l p_r(x)}{\partial^l x} \right)^2 dx \quad (46)$$

一维 WENO 重构过程 给定函数 $v(x)$ 在 cell (I_i) 内的平均值 $\{\bar{v}_i\}$ 。通过下述过程得到 cell boundary 上迎风偏置的 $2k - 1$ 阶近似, 记 $v_{i-\frac{1}{2}}^+$ 和 $v_{i+\frac{1}{2}}^-$ 。

1. 得到具有 k 阶精度的 k 个重构值 $v_{i+\frac{1}{2}}^{(r)}$ 与 $v_{i-\frac{1}{2}}^{(r)}$;
2. 确定理想权重值 d_r 与 \tilde{d}_r , 由对称性可知 $\tilde{d}_r = d_{k-1-r}$;
3. 计算光滑因子 $\beta_r, r = 0, \dots, k-1$;
4. 计算权重 ω_r 与 $\tilde{\omega}_r$;
5. 得到 $2k - 1$ 阶重构:

$$v_{i+\frac{1}{2}}^- = \sum_{r=0}^{k-1} \omega_r v_{i+\frac{1}{2}}^{(r)}, \quad v_{i-\frac{1}{2}}^+ = \sum_{r=0}^{k-1} \omega_r v_{i-\frac{1}{2}}^{(r)}$$

对于 5 阶 WENO (即 $k = 3$), 各常系数与权函数如下:

$$d_0 = \frac{3}{10}, \quad d_1 = \frac{3}{5}, \quad d_2 = \frac{1}{10} \quad (47)$$

$$\begin{cases} \beta_0 = \frac{13}{12} (\bar{v}_i - 2\bar{v}_{i+1} + \bar{v}_{i+2})^2 + \frac{1}{4} (3\bar{v}_i - 4\bar{v}_{i+1} + \bar{v}_{i+2})^2 \\ \beta_1 = \frac{13}{12} (\bar{v}_{i-1} - 2\bar{v}_i + \bar{v}_{i+1})^2 + \frac{1}{4} (\bar{v}_{i-1} - \bar{v}_{i+1})^2 \\ \beta_2 = \frac{13}{12} (\bar{v}_{i-2} - 2\bar{v}_{i-1} + \bar{v}_i)^2 + \frac{1}{4} (\bar{v}_{i-2} - 4\bar{v}_{i-1} + 3\bar{v}_i)^2 \end{cases} \quad (48)$$

表 2: $k = 3$ 时重构系数 c_{rj}

r	$j = 0$	$j = 1$	$j = 2$
-1	11/6	-7/6	1/3
0	1/3	5/6	-1/6
1	-1/6	5/6	1/3
2	1/3	-7/6	11/6

2.7.2 Finite volume 1D WENO

有限体积方法下，结合 Godunov 类方法（FDS），双曲守恒律的高阶 WENO 实现过程如下：

1. 对所有 i ，使用 WENO 得到 cell boundary 上的重构值 $u_{i+\frac{1}{2}}^-$ 与 $u_{i-\frac{1}{2}}^+$ ；
2. 根据重构得到的 cell boundary 上的左右值 $u_{i+\frac{1}{2}}^\pm$ ，选取任一方法计算数值通量（Godunov、HLL/HLLC）。

2.7.3 Finite difference 1D WENO

有限差分方法（结合 FVS）与上述思路不同，我们并非对变量重构得到 cell boundary 上的左右值继而计算数值通量，而是先在各离散点上计算分裂通量，随后重构 cell boundary 上的分裂通量值。

1. 选择任一通量分裂方法（Lax-Friedrichs、Steger-Warming、van Leer、AUSM），计算离散网格点上的分裂通量 $f^\pm(u_i)$ ；
2. 使用 $\bar{v}_i = f^+(u_i)$ 做 WENO 重构，得到正通量 $\hat{f}_{i+\frac{1}{2}}^+ = v_{i+\frac{1}{2}}^-$ ；
3. 使用 $\bar{v}_i = f^-(u_i)$ 做 WENO 重构，得到负通量 $\hat{f}_{i+\frac{1}{2}}^- = v_{i+\frac{1}{2}}^+$ ；
4. 得到数值通量 $\hat{f}_{i+\frac{1}{2}} = \hat{f}_{i+\frac{1}{2}}^+ + \hat{f}_{i+\frac{1}{2}}^-$ 。

2.8 Results and discussion

3 2D compression ramp

针对如下二维超声速来流射压缩拐角问题，选用合适的离散格式计算其数值解。

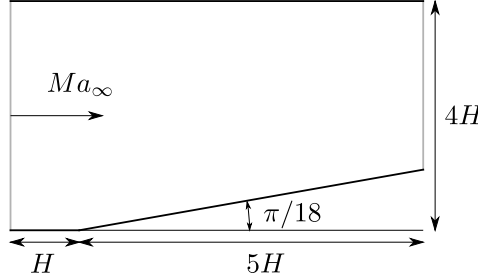


图 7: 压缩拐角

控制方程（二维 Euler 方程）如下：

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0 \\ \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial y} = 0 \\ \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v^2 + p)}{\partial y} = 0 \\ \frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho Eu + pu)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho Ev + pv)}{\partial y} = 0 \end{cases}, \quad (49)$$

$$\rho E = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{1}{2}\rho(u^2 + v^2), \quad p = \rho RT \quad (50)$$

来流条件为： $Ma_\infty = 3$, $T_\infty = 288.16 \text{ K}$, $p = 101.325 \text{ kPa}$ 。此外， $H = 10 \text{ m}$ ，气体参数 $R = 287 \text{ J/(kg} \cdot \text{K)}$, $\gamma = 1.4$ 。

3.1 2D Euler/N-S equations in general coordinates

由于本题压缩拐角并非简单矩形网格，需要针对一般几何做特殊处理，总的来说有三种思路：一般曲线坐标系下有限差分法，有限体积法，笛卡尔网格加浸没边界法。从技术路径考量，第一种方法较易实现，且方便使用高阶格式，被许多面向可压缩流科学研究的开源、in-house 代码采用。这里我们采用 CUDA 编写了一套 GPU 并行的二维一般曲线坐标系下 N-S 方程高阶有限差分求解器，若去掉粘性通量部分则转为 Euler 方程。

二维一般曲线坐标系下的可压缩 N-S 方程如下所示:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \xi} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \eta} = \frac{Ma_\infty}{Re_\infty} \left(\frac{\partial \mathbf{E}_v}{\partial \xi} + \frac{\partial \mathbf{F}_v}{\partial \eta} \right) \quad (51)$$

采用参考声速无量纲化 (叶创超, 2020), 无量纲参数

$$Ma_\infty = \tilde{U}/a_\infty, \quad Re_\infty = \frac{\rho_\infty a_\infty L_\infty}{\mu_\infty}, \quad Pr \quad (52)$$

空气的 Prandtl 数取 $Pr = 0.72$ 。其中守恒变量为 $\mathbf{U} = \frac{1}{J} (\rho, \rho u, \rho v, e)^T$, 无粘与粘性通量为:

$$\mathbf{E} = \frac{1}{J} \begin{pmatrix} \rho U \\ \rho U u + \xi_x p \\ \rho U v + \xi_y p \\ (e + p)U \end{pmatrix}, \quad \mathbf{E}_v = \frac{1}{J} \begin{pmatrix} 0 \\ \xi_x \tau_{xx} + \xi_y \tau_{xy} \\ \xi_x \tau_{xy} + \xi_y \tau_{yy} \\ \xi_x \beta_x + \xi_y \beta_y \end{pmatrix} \quad (53)$$

$$\mathbf{F} = \frac{1}{J} \begin{pmatrix} \rho V \\ \rho V u + \eta_x p \\ \rho V v + \eta_y p \\ (e + p)V \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_v = \frac{1}{J} \begin{pmatrix} 0 \\ \eta_x \tau_{xx} + \eta_y \tau_{xy} \\ \eta_x \tau_{xy} + \eta_y \tau_{yy} \\ \eta_x \beta_x + \eta_y \beta_y \end{pmatrix} \quad (54)$$

其中 J 为 Jacobian 矩阵

$$J = \left| \frac{\partial(\xi, \eta)}{\partial(x, y)} \right| = \begin{vmatrix} \xi_x & \xi_y \\ \eta_x & \eta_y \end{vmatrix} \quad (55)$$

U, V 为逆变速度

$$U = \xi_x u + \xi_y v, \quad V = \eta_x u + \eta_y v \quad (56)$$

粘性通量中

$$\tau_{xx} = \frac{2}{3} \mu (2u_x - v_y) \quad (57)$$

$$\tau_{yy} = \frac{2}{3} \mu (2v_y - u_x) \quad (58)$$

$$\tau_{xy} = \mu (u_y + v_x) \quad (59)$$

$$\beta_x = u\tau_{xx} + v\tau_{xy} - q_x \quad (60)$$

$$\beta_y = u\tau_{xy} + v\tau_{yy} - q_y \quad (61)$$

$$(62)$$

热流由 Fourier 定律给出

$$q_x = -\frac{\mu}{Pr(\gamma-1)} \frac{\partial T}{\partial x}, \quad q_y = -\frac{\mu}{Pr(\gamma-1)} \frac{\partial T}{\partial y} \quad (63)$$

压强与分子粘性系数分别由理想气体方程和 Sutherland 公式给出

$$p = (\gamma-1) \left[e - \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2) \right], \quad \mu = T^{3/2} \frac{1 + T_s/T_{ref}}{T + T_s/T_{ref}} \quad (64)$$

其中 $T_s = 110.4K$ 为 Sutherland 常数, T_{ref} 取 $290K$ 。

3.2 Numerical methods

3.2.1 Spatial discretization

空间离散方面, 对流(无粘)通量采用上一题中所用的 Steger-Warming 通量矢量分解结合 5 阶 WENO 重构(在物理空间而非特征空间中重构, 所以实际上会有振荡)。扩散(粘性)通量的导数采用 6 阶中心差分(CDS)计算(重复一阶导)。数值方法整体与 OpenCFD 相同。

3.2.2 Time advancing

时间上采用显式的 3 阶 TVD-RK 推进:

$$\begin{cases} U^* = U^n + \Delta t R(U^n) \\ U^{**} = \frac{3}{4}U^n + \frac{1}{4}U^* + \frac{1}{4}\Delta t R(U^*) \\ U^{n+1} = \frac{1}{3}U^n + \frac{2}{3}U^{**} + \frac{2}{3}\Delta t R(U^{**}) \end{cases} \quad (65)$$

3.2.3 Boundary conditions

为避免在插值过程中(WENO5、CDS6、坐标变换)频繁判断越界、做额外的降阶处理, 本程序采用虚拟网格的方法处理边界条件。

出入口 由于此题采用 Euler 方程, 全流场均为超声速, 所以直接设置超声速出入口: 入口处虚拟网格直接由来流条件给出, 出口则由内部节点直接外推得到(也称 transmissive boundary, 不会有波反射回计算域)。

壁面 采用反射壁面(reflective boundary), 即无穿透可滑移。设置虚拟网格值使壁法向速度为零, 切向速度梯度、密度梯度、压强梯度为零, 即壁面上:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = u_n = 0, \quad \frac{\partial \rho}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial u_\tau}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial n} = 0 \quad (66)$$

3.3 Results and discussion

图 9 展示了 384×256 网格下压缩拐角 Euler 方程解的计算结果。由于本程序在个人电脑 (NVIDIA GTX 1050 Ti) 上采用单精度浮点运算, 一般曲线坐标系下网格变换计算可能存在误差, 所以结果出现一些非物理振荡。初始状态设为静止流场, 入口产生一道正激波扫过压缩拐角, 随后建立起流场稳态解, 后附视频用以展示流动建立过程中的非定常激波与温度分布。

理论解 该构型下根据斜激波关系可以得到斜激波前后各物理量。

$$\tan \theta = 2 \cot \beta \frac{Ma_1^2 \sin^2 \beta - 1}{Ma_1^2 (\gamma + \cos 2\beta) + 2} \quad (67)$$

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{(\gamma + 1) Ma_1^2 \sin^2 \beta}{2 + (\gamma - 1) Ma_1^2 \sin^2 \beta} \quad (68)$$

$$\frac{p_2}{p_1} = 1 + \frac{2\gamma}{\gamma + 1} (Ma_1^2 \sin^2 \beta - 1) \quad (69)$$

其中气流偏转角 $\theta = \pi/18$ 及波前参数已知, 无量纲化的精确解为:

表 3: 压缩拐角理论解

θ	Ma_1	ρ_1	p_1	T_1	β	Ma_2	ρ_2	p_2	T_2
10°	3	1.4	1	1	27.38°	2.505	2.316	2.054	1.242

数值解 选取 $y = 10$ 上各物理量分布, 对比数值解与理论精确值, 可以发现结果吻合很好。因采用 WENO 格式, 间断捕捉较好, 没有数值振荡 (波后的振荡来源于网格变换运算精度不足, 而非通量计算的数值格式)。

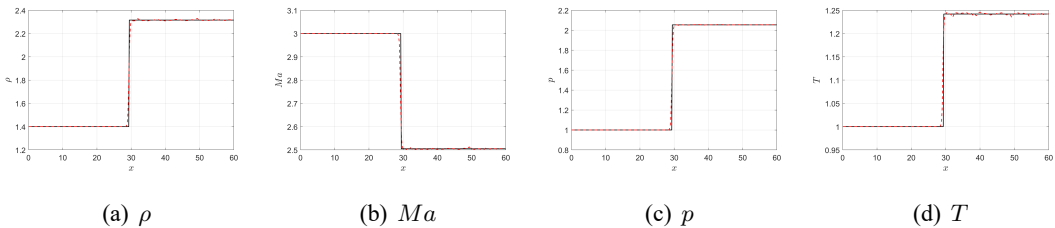
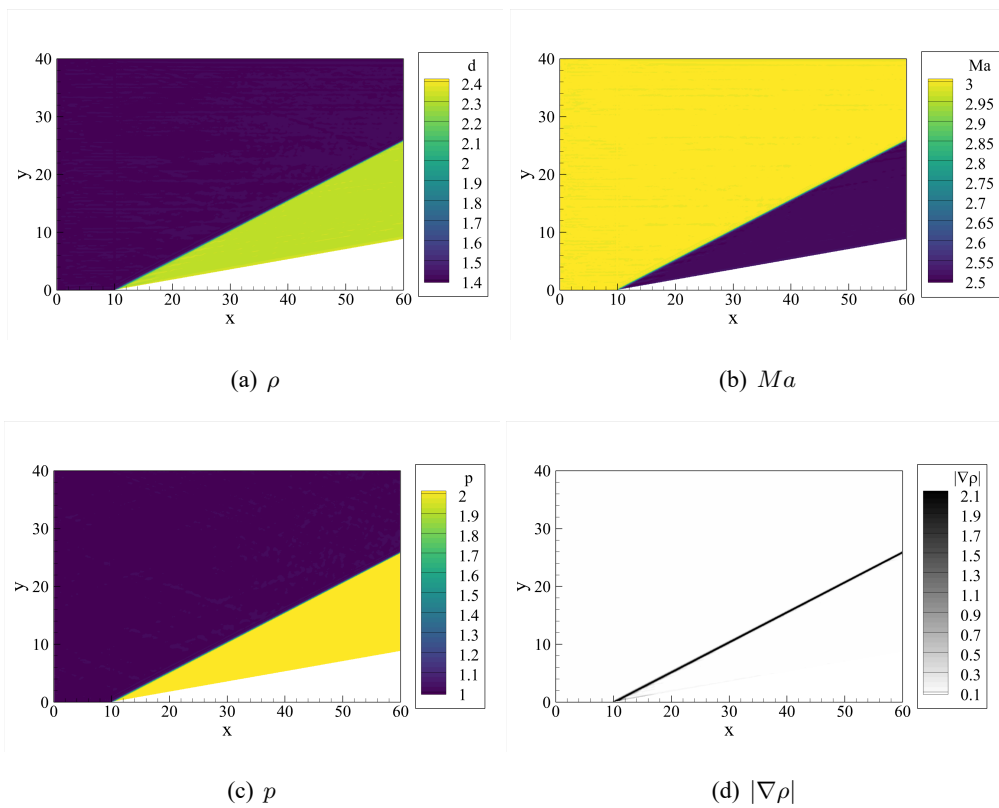


图 8: 384×256 网格下压缩拐角计算结果 ($y = 10$ 上变量分布), 实线为精确解, 虚线为数值解

图 9: 384×256 网格下压缩拐角计算结果

参考文献

- Joel H. Ferziger, Milovan Perić, and Robert L. Street. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer International Publishing, Cham, 2020. ISBN 978-3-319-99691-2 978-3-319-99693-6. doi: 10.1007/978-3-319-99693-6. URL <http://link.springer.com/10.1007/978-3-319-99693-6>.
- Y. Saad. *Iterative methods for sparse linear systems*. SIAM, Philadelphia, 2nd ed edition, 2003. ISBN 978-0-89871-534-7.
- Tim Sauer. *Numerical analysis*. Pearson, Hoboken, NJ?, third edition edition, 2018. ISBN 978-0-13-469645-4.
- P.H. Brazier. An optimum SOR procedure for the solution of elliptic partial differential equations with any domain or coefficient set. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 3(3):335–347, May 1974. ISSN 00457825. doi: 10.1016/0045-7825(74)90018-8. URL <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0045782574900188>.
- E. F. Toro. *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics: a practical introduction*. Springer, Dordrecht ; New York, 3rd ed edition, 2009. ISBN 978-3-540-25202-3 978-3-540-49834-6. OCLC: ocn401321914.
- Xu-Dong Liu, Stanley Osher, and Tony Chan. Weighted Essentially Non-oscillatory Schemes. *Journal of Computational Physics*, 115(1):200–212, November 1994. ISSN 00219991. doi: 10.1006/jcph.1994.1187. URL <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021999184711879>.
- Guang-Shan Jiang and Chi-Wang Shu. Efficient Implementation of Weighted ENO Schemes. *Journal of Computational Physics*, 126(1):202–228, June 1996. ISSN 00219991. doi: 10.1006/jcph.1996.0130. URL <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021999196901308>.
- B. Cockburn, Alfio Quarteroni, and Centro internazionale matematico estivo, editors. *Advanced numerical approximation of nonlinear hyperbolic equations: lectures given at the 2nd session of the Centro Internazionale Matematico Estivo (C.I.M.E.) held in Cetraro, Italy, June 23–28, 1997*. Number 1697 in Lecture notes in mathematics. Springer, Berlin ; New York, 1998. ISBN 978-3-540-64977-9.

叶创超. 基于 *GPU* 异构计算的可压缩复杂流动高精度数值模拟. 博士, 中国科学技术大学, 2020.