

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 25 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	The Riemann problem of Euler equations	8
2.2	Lax-Wendroff scheme	8
2.3	Flux vector splitting methods	8
2.3.1	Steger-Warming splitting	8
2.3.2	van Leer splitting	8
2.4	Flux difference splitting methods	8

2.4.1	Roe-Pike method	8
2.5	High order methods	8
2.5.1	WENO reconstruction	8
2.5.2	Finite volume WENO	8
2.5.3	Finite difference WENO	8
2.6	Results and discussion	8
3	2D compression ramp	9
3.1	Coordinate transformation	9
3.2	Dimensional splitting	9
3.3	Numerical methods	9
3.4	Results and discussion	9

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。

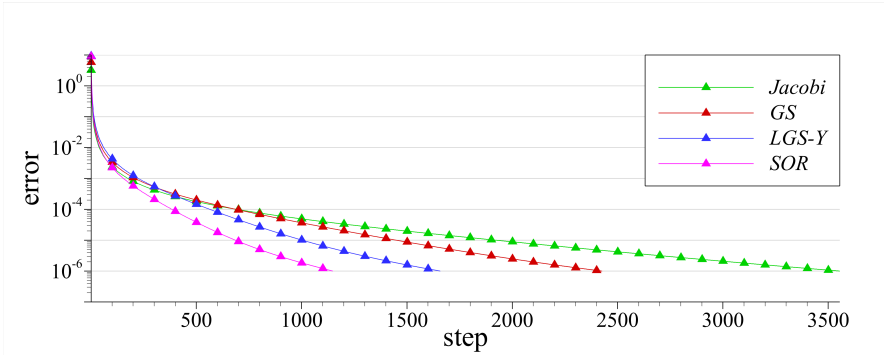
图 2 与图 3 分别展示了 Jacobi、GS、LGS-Y、SOR、MG-GS、MG-SOR 等方法求解前述五点离散 Poisson 方程边值问题的结果与残差分布。图 1 绘制了收敛曲线，其中 Jacobi、GS、LGS-Y、SOR 方法达到 10^{-6} 误差所需步数及计算耗时见表 1。¹

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

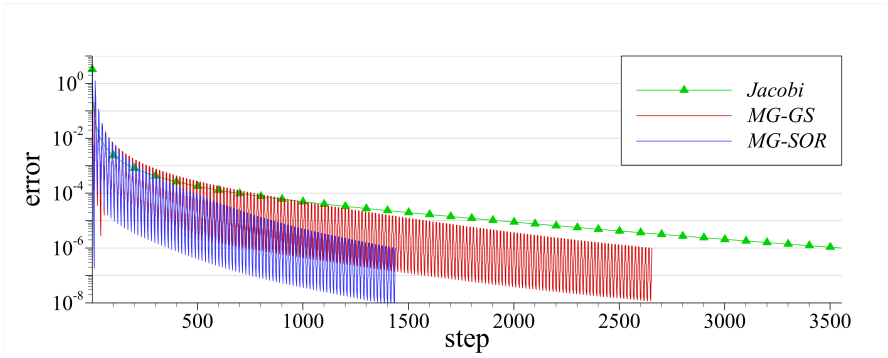
	Jacobi	GS	LGS-Y	SOR	MG-GS	MG-SOR
step	3555	2427	1658	1148 [258]	2656 (876)	1440 (475)
time(s)	1.856	1.167	0.807	0.622 [0.144]	0.541	0.308

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

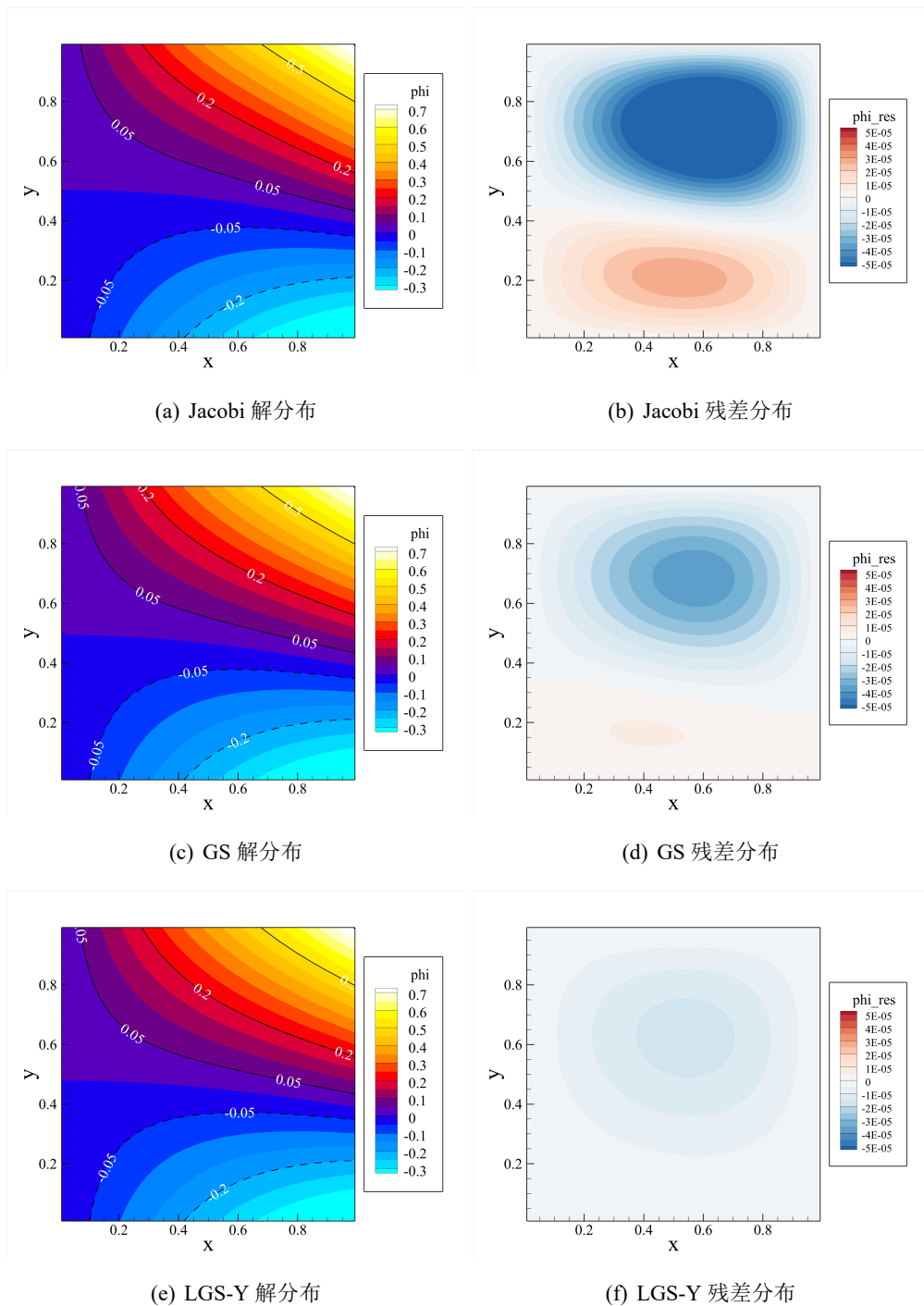


图 2: 各种迭代法求解 Poisson 方程的结果与残差

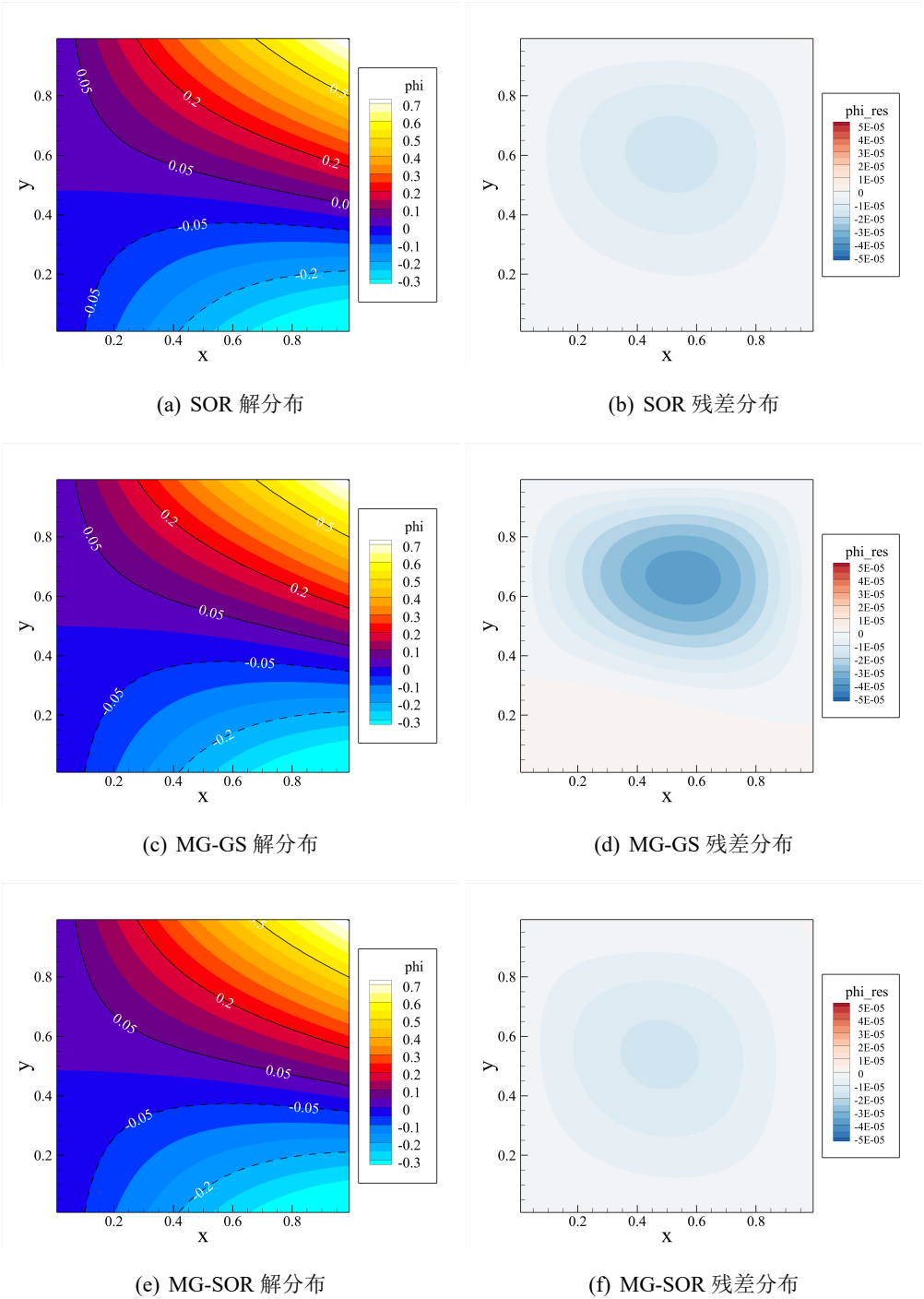


图 3: 各种迭代法求解 Poisson 方程的结果与残差

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 The Riemann problem of Euler equations

2.2 Lax-Wendroff scheme

2.3 Flux vector splitting methods

2.3.1 Steger-Warming splitting

2.3.2 van Leer splitting

2.4 Flux difference splitting methods

2.4.1 Roe-Pike method

2.5 High order methods

2.5.1 WENO reconstruction

2.5.2 Finite volume WENO

2.5.3 Finite difference WENO

2.6 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。

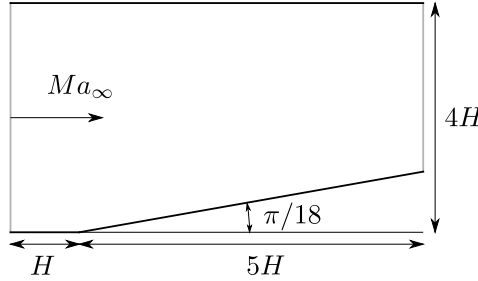


图 4: 压缩拐角

控制方程（二维 Euler 方程）如下：

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0 \\ \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial y} = 0 \\ \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v^2 + p)}{\partial y} = 0 \\ \frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho Eu + pu)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho Ev + pv)}{\partial y} = 0 \end{cases}, \quad (19)$$

$$\rho E = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{1}{2}\rho(u^2 + v^2), \quad p = \rho RT \quad (20)$$

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 Coordinate transformation

3.2 Dimensional splitting

3.3 Numerical methods

3.4 Results and discussion

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>.