

* 专题评述 *

高精度有限差分法与复杂流动的数值模拟*

马延文 傅德薰

中国科学院力学研究所, LNM, 北京 100080

摘要 针对非定常多尺度复杂流动特征, 介绍了高精度有限差分法. 用 Taylor 级数和 Fourier 分析两种方法分析了数值解的特性, 色散和耗散效应可能给数值解带来的影响, 及对网格 Reynolds 数的限制, 给出了物理尺度和网格尺度之间的关系. 对比分析了谱方法和差分法中的混淆误差. 最后数值模拟了几种典型复杂流动: 可压三维平面混合流, 充分发展的可压和不可压槽道湍流, 及二维涡——激波干扰声场.

关键词 复杂流动 可压湍流 直接数值模拟 紧致格式 高精度格式

计算流体力学(CFD)是现代流体力学的重要组成部分. CFD 已成为解决流体力学问题的三大手段之一. CFD 的发展主要表现在方法研究的进展, 网格生成技术的成就, 求解效率的改进, 并行算法的研究, 以及图像处理等方面. CFD 的成就表现在求解实践问题的范围, 求解问题的深度和复杂程度及解决实际问题能力的提高.

复杂流动包括由复杂物形所导致的流动, 非稳定性导致的非定常多尺度流动, 以及高温所导致的非平衡流动等. 本文所涉及的复杂流动主要指第二种. 非定常多尺度复杂流动的主要特征是: 三维, 非定常, 非稳定的多尺度流动. 如, 在湍流中有大尺度的宏观结构, 也有包括 Kolmogoroff 尺度的小结构. 又如, 在气动噪声的生成与传播中, 声能与主流能量之间有量级之差, 声波的波长与流动结构的特征尺度有量级之差.

为了能正确捕捉到各种不同尺度的流动结构, 需要对物理尺度和网格尺度进行研究. 例如对湍流, 网格尺度应是 Kolmogoroff 尺度 η 有着同样的量级. 考虑到 3 个坐标方向和空间分辨率要求总的计算量大致为 $ReL^{9/4}$ 的量级. 目前通过直接数值模拟(DNS)来解决工程问题条件还不成熟, 但可通过简单模型湍流的 DNS 研究湍流的生成机理, 研

究解决实际湍流的大涡模拟方法或工程湍流的模式和湍流控制等. 为了正确捕捉到非定常多尺度复杂流动结构, 要求数值方法的误差能得到控制, 以便不污染物理的小尺度结构^[1]. 可通过两种途径来提高数值解的精度, 一是减小网格的尺寸, 二是提高格式的精度. 由于计算资源的限制, 在充分利用现有计算资源的同时采用高精度方法是直接数值模拟湍流的重要途径.

为确保 DNS 结果的可靠, 应对研究对象和模拟手段尽可能了解. 本文侧重对模拟手段, 即模拟方法的认识, 这有助于了解方法的可靠程度, 可能带来的问题和提出改进办法. 本文结合作者多年的工作^[1], 参照国内外有关研究采用两种分析方法, 分析和讨论了与非定常多尺度复杂流动数值模拟相关的一些问题, 如高精度有限差分法的研究, 物理波与数值波的传播特性及网格尺度与精度的关系, 物理黏性及数值耗散与网格 Reynolds 数之间的关系, 数值计算中的混淆误差等.

1 多尺度复杂流动的模拟方法

早期人们曾认为, 二阶精度的格式已可满足应用上的要求. 随着求解问题日趋复杂, 方法研究及认识的深化, 人们逐渐认识到, 为直接数值模拟像

2001-08-13 收稿, 2002-03-06 收修改稿

* 国家自然科学基金(批准号: 19972070, 19872069, 110176033)和国家重点基础研究发展规划项目(G1999032805)资助

E-mail: fudx@lmm.imech.ac.cn

湍流这类复杂流动, 研究更高精度的方法是需要的^[2]. 目前人们已成功采用高精度格式数值模拟了很多复杂流动^[3,4].

1.1 高精度有限差分方法

这里重点介绍紧致型差分格式的基本思想及其数值行为特性. 考虑如下之模型方程及对应的半离散化方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial u}{\partial x}, \quad \mu = \text{常数}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_j}{\partial t} + \frac{F_j}{\Delta x} = \frac{\mu}{\Delta x^2} S_j, \quad (2)$$

$F_j/\Delta x$ 为 $\partial f/\partial x$ 的逼近, $S_j/\Delta x^2$ 为 $\partial^2 u/\partial x^2$ 的逼近.

传统型逼近. 传统型逼近指(2)式中的导数逼近式 F_j 和 S_j 可直接通过离散函数 u_j 或 f_j 的线性组合来表示. 如为一阶导数的逼近形式可写为

$$F_j = h_{j+1/2} - h_{j-1/2}, \quad h_{j+1/2} = \sum_m a_m f_{j+m+1}. \quad (3)$$

文献[4]中给出了具有五阶逼近精度的迎风偏斜逼近式.

对称型紧致差分逼近. 对一阶导数的对称紧致差分逼近式可写为如下形式

$$\begin{aligned} & \sum_m \alpha_m (F_{j+m} + F_{j-m}) / (2m) = \\ & \sum_m \alpha_m (f_{j+m} - f_{j-m}) / (2m), \end{aligned} \quad (4)$$

式中包含了函数值的线性组合, 也包含了导数的线性组合. 紧致型逼近式可利用较少的网格基架点达到较高阶的逼近精度. 可根据精度需要利用 Taylor 级数展开法来确定系数 α_m 和 a_m . 文献[5]中给出了 6~10 阶的紧致差分逼近式和具有谱精度的逼近式.

迎风型紧致差分逼近式. 为了使差分格式既具有高的精度又能抑制超高波数的混淆误差和非物理振荡, 我们于 1989 年发展了依赖于参数的具有三阶精度的迎风紧致格式 (upwind compact difference)^[6]. 对于方程组, 可利用分裂技术将 Euler 方程或 N-S 方程中的流通矢量 f 分裂为正负矢量 $f^+ + f^-$, 然后采用迎风紧致格式离散. 格式极为简便, 易于求解, 且不需矩阵运算和矩阵求逆. 我们还于 1993 年构造了如下具有五阶精度的迎风紧致格式^[7]

$$\begin{aligned} & [F_j + 1/5 \delta_x^2 F_j - \sigma (F_{j+1} + F_j) + \sigma (F_j + F_{j-1})] = \\ & h_{j+1/2} - h_{j-1/2}, \\ & h_{j+1/2} = [29(f_{j+1} + F_j) + (f_{j+2} + f_{j-1})] / 60 - \\ & \sigma [9(f_{j+1} - f_j) + f_{j+2} - f_{j-1}] / 6. \end{aligned} \quad (5)$$

取 $\sigma = 0$ 时可得对称型六阶紧致逼近式^[5]. 当 $\partial f/\partial u = c = c^+ > 0$, 并取 $\sigma = 1/5$ 则可得最简单的具有五阶逼近精度的迎风紧致格式, 此时沿 j 增长方向很易求解, 且不需矩阵运算和矩阵求逆.

于 1989 年 Tolstykh 给出了其最终形式的三阶 (CUD3) 和五阶 (CUD5) 紧致迎风格式 (compact upwind difference)^[8]. 他从方程组出发, 将特征符号的分裂溶入了差分逼近式中, 在求解 F_j 时需矩阵运算和三对角矩阵求逆. 其格式的主对角元素不占优, 对标量方程 $c > 0$ 时原函数值分布在两个网格点上, 而导数逼近值分布在 3 个网格点上, 这增加了计算的复杂性和工作量.

文献[9]中也发展了自己的迎风紧致格式, 它是建立在基于分裂后的流通矢量之上的, 因而在求解 F_j^\pm 时只需 3 对角线矩阵求逆, 而不需进行 3 对角块矩阵求逆.

超紧致型差分逼近式. 文献[10]中构造了可达任意逼近精度的超紧致型差分逼近式, 在逼近式中包含了一阶导数的逼近值, 也包含了高阶导数的逼近值. 文献[11]利用具有六阶精度的超紧致逼近式计算了由于激波-涡干扰而导致的四极子声场. 超紧致型差分逼近式和谱方法一样可达任意阶精度, 但可给出更多的信息 (高阶导数的逼近值). 经 Fourier 分析可知, 同阶精度的格式紧致型格式有比传统型格式更宽的正确模拟频带, 而超紧致型格式有比紧致型格式更宽的正确模拟频带. 对同样精度的格式, 紧致型逼近比传统型需较少的网格基点, 超紧致型逼近式比紧致型逼近需更少的网格基点.

基于非等距网格上的差分逼近. 流场计算中由于在局部区域内流动参数梯度很大而需相应加密网格. 通常可采用两种方法进行网格加密, 一是坐标变换, 一是直接采用非等距网格. 从精度角度讲采用后者更为有利, 文献[4]中进行不可压槽道湍流直接数值模拟时其五阶迎风偏斜逼近式是由非等距 Lagrange 插值多项式而得. 文献[12]中给出了基于非等距网格的超紧致型逼近, 文献[13]中给出了基于非等距网格的对称紧致逼近, 文献[14]中发展了基于非等距网格的五阶迎风紧致格式, 并用其数值

模拟了可压和不可压槽道湍流。计算表明在参数梯度变化大的地方,如物面边界附近,采用非等距网格差分比同阶精度但建立在坐标变换网格上的差分逼近式在精度有量级性的提高。

1.2 格式的分析方法

这两种分析方法是 Taylor 级数法和 Fourier 分析法。前者为定性和量级分析,适于对宏观特性的分析。对多尺度复杂流动的数值模拟后者可提供更多的信息。

Taylor 级数展开法。该方法指对方程(2)进行 Taylor 级数展开,得到一修正方程,通过修正方程来研究格式特性。可借助于偏微分方程理论从修正方程出发来认识差分方程解的行为特性。对应于(2)方程的修正方程具有形式

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial u}{\partial x} = \sum_{m>1} \mu'_m \Delta x^{2(m-1)} \frac{\partial^{2m} u}{\partial x^{2m}} + \sum_{m>1} \mu_{1,m} \Delta x^{2m-2} \frac{\partial^{2m-1} f}{\partial x^{2m-1}} + \sum_{m \geq 1} \mu_{2,m} \Delta x^{2m-1} \frac{\partial^{2m} f}{\partial x^{2m}}, \quad (6)$$

Δx 为空间步长,黏性项取中心差分,含 μ'_m 项为由黏性项离散引入的误差,含 $\mu_{1,m}$ 和 $\mu_{2,m}$ 项分别为对流项离散引入的色散和耗散误差。可将(6)式写为如下形式^[15]。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[(\mu' + \mu_1 + \mu_2) \frac{\partial u}{\partial x} \right], \quad (7)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[(\mu' + \mu_2) \frac{\partial u}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left(a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right), \quad (8)$$

$$\mu' = \sum_{m>1} \mu'_m \Delta x^{2m-2} \frac{\partial^{2m-1} u}{\partial x^{2m-1}} / \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (9)$$

$$\mu_1 = \sum_{m>1} \mu_{1,m} \Delta x^{2m-2} \frac{\partial^{2m-2} f}{\partial x^{2m-2}} / \frac{\partial f}{\partial x}, \quad (10)$$

$$\mu_2 = \sum_{m \geq 1} \mu_{2,m} \Delta x^{2m-1} \frac{\partial^{2m-1} f}{\partial x^{2m-1}} / \frac{\partial f}{\partial x}, \quad (11)$$

$$a = \mu_1 \frac{\partial u}{\partial x} / \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad c = f_u, \quad (12)$$

方程(7)和(8)是 Taylor 级数展开法的主要参考方程。以后主要讨论 μ_2 , μ_1 或 a 对解的影响。这种

分析可用于非线性情况,但对非线性问题通常难以求得修正方程和对高波量进行分析。该方法适于进行定性或量级分析。例如,格式形式精度的量级,耗散特性和传播特性等。难以用其对不同尺度量的精度进行分析。

Fourier 分析法。对线性问题当求解域为 $[-\infty, +\infty]$ 或在有限域 $[-L, +L]$ 的边界上满足周期条件,则问题的解可通过 Fourier 级数来表示。Fourier 分析法为取初值为单个 Fourier 分量,用以研究数值解的精度与行为。通过 Fourier 分析法可了解不同尺度量离散导数的逼近精度,包括对流项和黏性项的逼近精度。在单纯进行精度分析时并不要求被离散的函数是线性的。经对 Fourier 分量的分析可知 $\mu' < 0$ (黏性项取中心差)。现在考虑线性问题。设(1)式中之 $f = cu$, $c = \text{常数} > 0$ 。初值 $u(x, 0) = \exp(ikx)$, 方程(1)的准确解

$$u(x, t) = \exp[-\mu k^2 t] \exp[ik(x - ct)], \quad (13)$$

取 $u(x_j, 0) = \exp[ikx_j]$ 为初值,则差分方程(2)的准确解为

$$u(x_j, t) = \exp \left[\left(-\mu k^2 \frac{k_d}{\alpha^2} - \frac{ck_r}{\Delta x} \right) t \right] \exp \left[ik \left(x_j - c \frac{k_i}{\alpha} t \right) \right], \quad (14)$$

$\alpha = k\Delta x$, $k_e = k_r + ik_i$ 为修正波数, k_r 与数值耗散有关, k_i 与数值波的传播速度有关, k_d 与黏性项的逼近有关。对具体的格式可以求出 k_r , k_i 和 k_d 的分析表述式来。可利用(13)和(14)式来分析数值解的精度,行为特征以及对应格式所能模拟的尺度范围等。这里强调了对不同尺度物理量精度与特性分析。对常用格式(14)中的 $k_d < \alpha^2$, 即黏性项离散后的高波耗散量小于对应的物理耗散量。

1.3 波的传播特性及精度与网格尺度

数值解的色散效应。可参照(8)式中的系数 a 来分析数值解的色散特性。当扰动波的传播方向与物理波传播方向一致时 (a/c ($c = \partial f / \partial u$) > 0) 对应正色散,反之为负色散 ($a/c < 0$)。通过 Fourier 分析可得如下关系

$$(k_i - \alpha) / \alpha \begin{cases} \geq 0 & \text{正色散,} \\ \leq 0 & \text{负色散.} \end{cases} \quad (15)$$

数值解中的低波量能很好地逼近于对应的物理波量,对于不同精度的差分格式,数值解中逼近物理波的波数范围不同.随波数的增加数值解波的分量与对应的物理波量之间的差异加大.这将导致数值解中小尺度量受到污染.这种污染来自于数值耗散,它导致波幅值的变化.也来自于数值色散,它导致小尺度结构的偏离.研究数值解对小尺度物理量的捕捉能力和高波量可能导致的数值解行为变化是很有益处的.

文献[16]指出,数值解中的波束以群速度传播.其群速度定义为(归一化后)

$$D(\varepsilon) = dk_i(\alpha)/d\alpha. \quad (16)$$

文献[1]中参照群速度对格式进行分类.它们是:快型(FST)、慢型(SLW)和混合型(MXD)格式.这种分类强调了波的传播特性.对半离散化方程而言无耗散(中心型)或低耗散(弱迎风偏斜型)格式为SLW型,较强迎风偏斜型格式为MXD型,但强迎风偏斜型格式可能是不稳定的.个别紧致型和超紧致型格式为FST型.数值解中的低波分量都能很好的以物理解的对应群速度传播,称这部分波群为基本波束.高波分量的传播特性分别是:

SLW型格式:数值解中的高频波束出现于基本波之后,其中部分与基本波束作同向运动,部分为驻波,部分作反向运动;

FST型格式:数值解中的高频波束与基本波束作同向运动,但出现在基本波群之前;

MXD型格式:中低波束有FST型格式的传播特性,高波主要呈现为SLW型格式的特性.

这一分析告诉我们,数值解中各种波量是如何演化的.在求解多维问题时数值高频波呈现为各向异性特性.这意味着,在模拟多尺度物理量时,如果格式的模拟尺度和精度不够则所得到的的小尺度物理量受到严重污染.为了提高对小尺度物理量的捕捉,需缩小网格尺寸或提高格式的逼近精度.

经启示性分析可知,在较宽的波数范围内FST型格式对应于正色散,SLW型格式对应于负色散.MXD型格式的低中和中高波束对应于正色散,高波束对应于负色散,但有着强的耗散效应. $\mu_1 \geq 0$ 对应于误差波指向物理激波.

数值解的精度与网格尺度.上面分析了定性的结果.下面将分析物理尺度与网格尺度之间的关系.我们取

$$\varepsilon(\alpha) = |1 - k_i(\alpha)/\alpha| \quad (17)$$

来度量数值解中传播特性的误差,即色散误差.图1中给出了几个中心型格式的误差随 $\alpha = k\Delta x$ 变化的情况,图2中给出了几个迎风型格式的误差变化.图中还给出了 $\varepsilon = 0.02$ 和 0.05 的曲线,从中可确定满足误差要求所对应的最大波数.

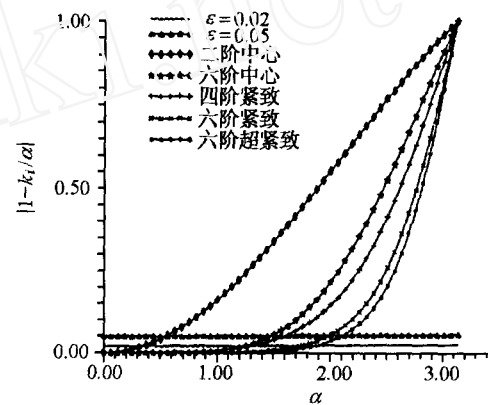


图1 对称格式 $|1 - k_i/\alpha|$ 随 α 的变化

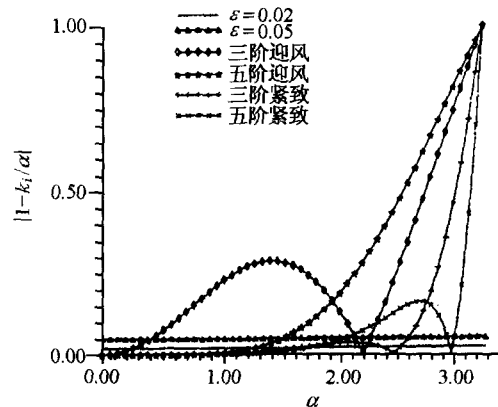


图2 迎风格式 $|1 - k_i/\alpha|$ 随 α 的变化

要求正确模拟的最小尺度依赖于能谱,对于湍流,它一般大于Kolmogoroff尺度.文献[17]指出,在弯曲管流中大部分湍能的耗散出现于大于 15η 的尺度量上(基于平均耗散).设所考虑的物理问题要求数值方法应分辨的物理量尺度为 3η ,其中 η 为Kolmogoroff尺度,则对应的波数为 $k_0 = 2\pi/3\eta$.可根据(17)式来确定满足精度要求的最大 $\alpha_0 = k_0 h_0$,确定波数 k_0 后可得对步长的要求

$$h_0 = \frac{\alpha_0}{2\pi} 3\eta = a_0 \eta, \quad (18)$$

可用 α_0 度量对网格尺度的要求, 表 1, 2 中给出了对应于 $\epsilon = 0.05, 0.02$ 取物理波长为 3η 时几个中心型和耗散型格式所能允许的最大步长.

表 1 中心型格式

	二阶中心	六阶中心	四阶紧致	六阶紧致	六阶超紧致
0.05	0.26	0.71	0.77	0.95	1.01
0.02	0.17	0.60	0.63	0.84	0.90

表 2 迎风格式

	二阶迎风	Rai Moin	三阶紧致	五阶紧致
0.05	0.19	0.71	1.20	0.96
0.02	0.12	0.60	0.77	0.82

从上面的讨论中可知, 对取定的物理尺度, 高精度格式可以给出更精确的解. 在取定误差情况下高精度格式能正确捕捉的波数范围更广. 在取定误差情况下, 高精度方法可放大空间步长. 当然, 所感兴趣的物理尺度内必须布有网点.

1.4 数值黏性及精度与网格 Reynolds 数

数值黏性与精度. 非对称型格式的采用将导致数值耗散. (7)式中的 μ_2 确定了格式的耗散特性. 可参照(14)式中的 k_r 来分析耗散率, 精度与网格尺度之间的关系. k_r 的存在有利于格式的稳定性, 但过大的 k_r 可使小结构物理量耗散掉. 图 3 中给出了不同耗散型格式 k_r 随 α 的变化曲线. 可以看出, 在限定同样耗散率情况下高精度格式能正确模拟波数的范围更广, 或对取定的波数高精度格式的耗散率更小. 为使数值解中的小尺度量不被污染采用高精度格式是有益的.

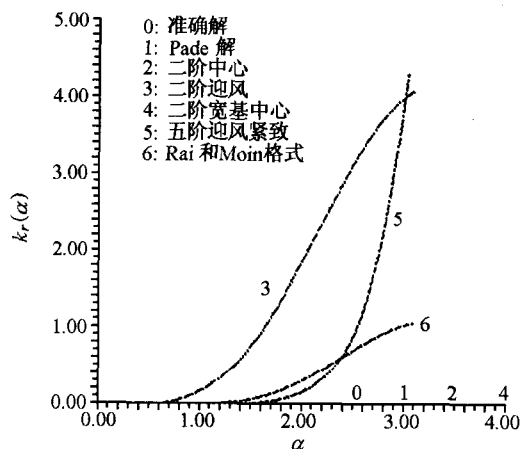


图 3 迎风格式 $k_r(\alpha)$ 随 α 的变化

物理黏性与网格 Reynolds 数. 对多尺度问题很多小尺度物理量的幅值比较小. 过大的数值黏性会

掩盖真实的物理黏性, 因而对差分黏性需有一定的限制. 参照(7)式可很自然的要求 $\mu_2 < \mu$. 如果格式为 $2M - 1$ 阶精度, 取(11)式中主导项, 则物理黏性占优要求^[15,18]

$$Re\Delta x < \left| \frac{\partial u}{\partial x} / \left[\mu_{2,M} \Delta x^{2M-2} \frac{\partial^{2M-1} u}{\partial x^{2M-1}} \right] \right|, \quad (19)$$

这里取 $f = cu$, $Re = c/\mu$. 可知, 对网格 Reynolds 数的限制与格式有关, 与格式的精度有关, 与解的行为有关. 随精度的提高可放宽对网格 Reynolds 数的限制. 对一阶精度的迎风格式 $M = 1$, $\mu_{2,1} = 1/2$, 从而可得 $Re\Delta x < 2$.

上面的分析是一种定性的或是量级上的分析. 从中难以了解对不同尺度物理量的要求. 文献[15]中利用 Fourier 分析法讨论了对网格 Reynolds 数的限制. 从(14)式中可知, 对应于每个 Fourier 分量差分解的耗散率为 $ck_r/\Delta x$. 一个很自然的要求是数值耗散与物理耗散的比应是一小量, 即

$$\frac{ck_r}{\Delta x} / \mu k^2 < \epsilon, \quad (20)$$

对于给定的差分格式和物理问题, 要求分辨的最小物理尺度所对应的最高波数为 $k_0(\alpha_0 = k_0\Delta x)$, 故(20)式可写为

$$Re\Delta x < g(\alpha_0) = \epsilon \frac{\alpha_0^2}{k_r(\alpha_0)}. \quad (21)$$

图 4 中给出了 $\epsilon = 0.05$ 时对 $Re\Delta x$ 的限制曲线

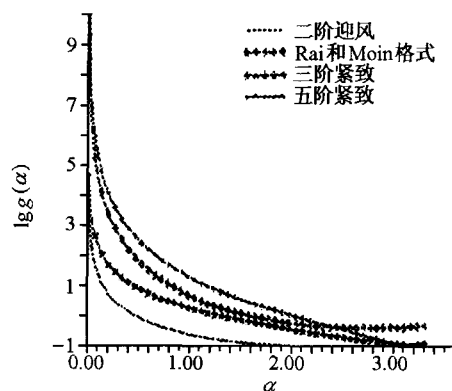


图 4 迎风格式 $g(\alpha)$ 随 α 的变化 ($\epsilon = 0.05$)

$g(\alpha)$ 随 α 的变化. 如果 $Re\Delta x$ 落入 $g(\alpha)$ 的下方, 则

表明 $Re\Delta x$ 是满足物理黏性占优条件的。从图中可知, 对取定的波数 $\alpha = \alpha_0$, 则随格式精度的提高可放宽对网格 Reynolds 数的限制, 当取 Reynolds 数的限制(取 $\epsilon = \epsilon_0$), 则提高精度可放宽满足这一限制条件的波数范围。上面讨论的是由于空间离散引入的色散和耗散效应。在对时间导数进行离散时会引入新色散和耗散效应。

关于定常激波的计算已取得了很大进展, 但对包括湍流在内的非定常多尺度复杂流场中的激波捕捉技术是仍需进一步研究的问题。在可压湍流中利用 DNS 捕捉非定常小激波是对 CFD 的一个挑战^[19]。关于激波捕捉法将在以后的文章中进一步讨论。

1.5 数值解中的混淆误差

偏微分方程离散后将产生误差。不同类型方法所产生的误差不同。本节将简单讨论离散化后的(包括差分法和谱方法)误差效应。谱方法由于其高精度最早被用来数值模拟湍流^[20,21]。文献[4]中利用五阶迎风偏斜格式数值模拟了充分发展不可压槽道湍流, 并指出, 有限差分法和谱方法一样可用于数值模拟湍流问题。谱方法和高精度有限差方法有各自的特点。他们主要是:

谱方法: 分量的空间导数准确, 整体特性刻划精度高, 适用于简单求解域和简单边界条件, 非线性计算混淆误差大, 激波捕捉困难, 方法逻辑复杂;

差分法: 分量的空间导数有误差, 局部特性刻划精度高, 适于复杂求解域和复杂边界条件, 非线性计算混淆误差小, 易捕捉激波, 方法逻辑简单。

谱方法中混淆误差来源于非线性乘积项中包含了离散 Fourier 变换(DFT, 或其快速算法 FFT)无法识别的高波成分(运用离散 Fourier 变换的谱方法称为拟谱方法, 后面所说谱方法均指拟谱方法)。由于 DFT(或 FFT)的特点, 高于其可识别波数范围的波将被误认为是某一波数的低波, 并被折合到低波分量中去了。这一过程形成两种误差, 一是无法识别的高波效应被截去了, 称其为非线性截断。另一被误折合到低波分量中去了, 称其为混淆误差。谱方法中只要有非线性运算就有混淆误差。

在差分法中非线性运算本身不会带来新的误差。其误差来源于高波量的导数差分逼近。高波量的导数作用(对流特性)没有正确反映到数值解中去, 称其为高波截断误差。高波量的导数作用(对流特性)以错误信息反映到数值解中去了, 称这部分

误差为差分分解中的混淆误差。可压 N-S 方程可写为全守恒型, 非守恒型和 Lamb-Gromeko 型。由于方程中出现 3 个量相乘的形式, 无论采用哪种方程的表达形式, 采用谱方法都会带来较大的混淆误差(相对于不可压 N-S 方程), 当采用有限差分法进行离散时方程的不同形式引入的混淆误差不同。相对而言, 全守恒型方程引入的混淆误差较大, Lamb-Gromeko 型次之, 非守恒型方程引入的混淆误差较小。在利用谱方法时为克服混淆误差的影响需提高截断的波数(3/2 规则)。利用差分法时混淆误差易于控制, 例如可采用耗散型格式。R-K 法也可引入新的耗散效应。可压湍流的 DNS 多采用有限差分法。

2 多尺度复杂流动的数值模拟

2.1 可压混合层流动转换到湍流的直接数值模拟。

文献[1, 3]中利用五阶迎风紧致差分逼近 N-S 方程的对流项, 六阶对称紧致差分逼近黏性项, 时间方向采用三阶 R-K 方法, 直接数值模拟了对流 Mach 数 $Ma = 0.2, 0.8$ 和 1.2 , $Re = 100, 200$ 和 200 时的平面混合流, 给出了可压混合层流动从失稳, 拟序结构的形成, 转换, 直到湍流的整个过程。数值模拟结果表明, 在对流 Mach 数较小时 ($Ma = 0.2$) 流动初始失稳后产生了涡的对并, 这是混合层增长的重要机制, 流动经二次失稳后发展到湍流, 与不可压流动类似; 在对流 Mach 数较大时 ($Ma = 0.8, 1.2$), 流动是从初始失稳直接发展到湍流的, 没有涡对并的产生。在 $Ma = 0.8$ 时, 流动初始失稳后在 $t = 36.63$ 时形成了三维 Δ 涡, $t = 52.37$ 时形成了马蹄涡, 图 5 中给出了马蹄涡形成后流场从大尺度结构破碎形成小尺度和更小尺度涡, 最后转换到湍流的过程。证实了在对流 Mach 数较大时可压平面混合流的转换机制与不可压流动的较大差异。数值模拟结果还表明, 小尺度涡结构的产生伴随着从对称结构转为非对称结构的过程, 在图 5 中可看出, 对称性逐渐受到破坏, 形成非对称结构。流动达到充分发展湍流时, 在统计意义下对称性将重现。 $Ma = 1.2$ 的流动发展与 $Ma = 0.8$ 时类似, 只是 Δ 涡和马蹄涡的形成发展过程更慢一些, 在 $Ma = 1.2$ 的流场中发现了非定常随机激波。在此基础上, 研究了可压缩效应对湍流能量输运和耗散特征的影响。指出, 膨胀耗散 ϵ_d 与总耗散量相比是一小量, 如图 6 所示, 在该图中给出了 $Ma = 1.2, Re = 200, t = 63.1, 91.83$ 时湍流生成项 P_{kk} , 平均压力

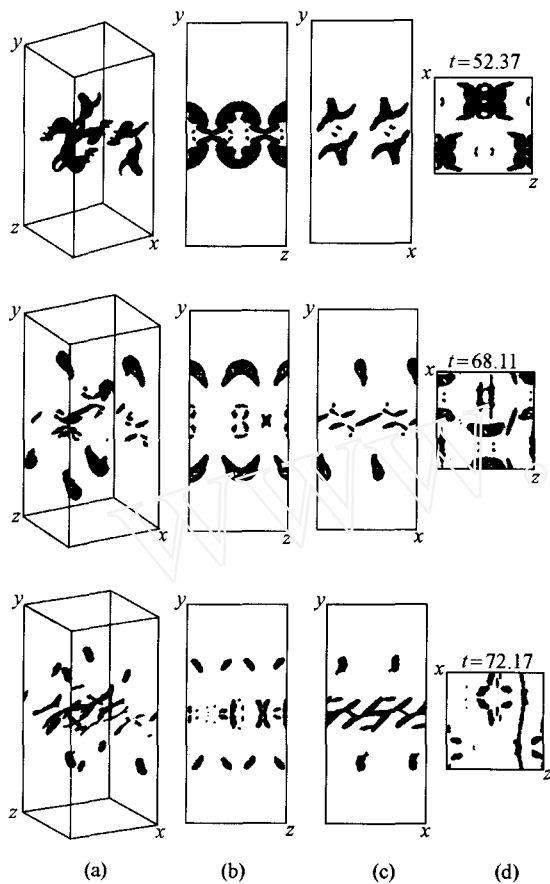


图5 可压平面混合流不同时刻压力等值面
(a) 三维等值面; (b) 前视图; (c) 侧视图; (d) 俯视图

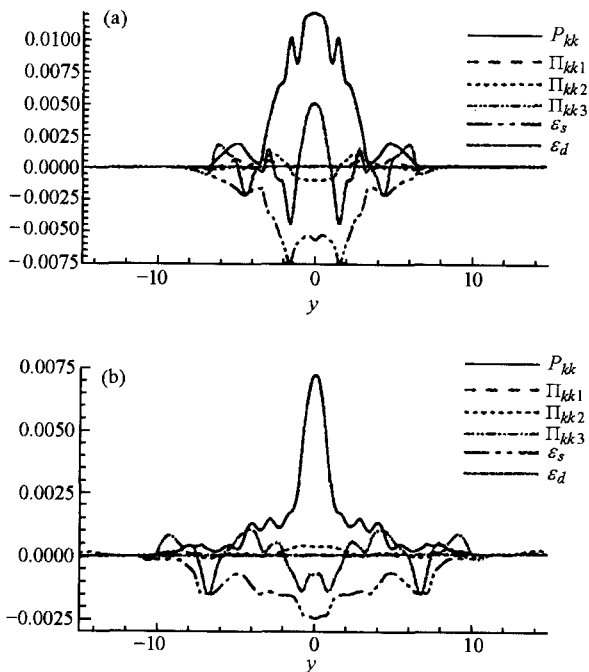


图6 P_{kk} , Π_{kk1} , Π_{kk2} , Π_{kk3} , ϵ_s 和 ϵ_d 随 y 的变化 ($Ma=1.2$)
(a) $t=63.10$; (b) $t=91.83$

作功项 Π_{kk1} , 压力-膨胀项 Π_{kk2} , 压力-速度相关项 Π_{kk3} , 螺旋耗散项 ϵ_s 和膨胀-耗散项 ϵ_d 随 y 的变化. 总耗散量为 $\epsilon_{kk} = -\overline{\rho}(\epsilon_s + \epsilon_d)$; 湍流生成项随着对流 Mach 数的上升(可压缩性增加)而减小, 如图7所示, 这表明了可压缩性对湍流发展的抑制作用. 压力-膨胀项随着对流 Mach 数的增加而增加且产生振荡, 这直接影响湍流能量的再分配, 导致噪声的产生. 然而对湍能的生成影响不大.

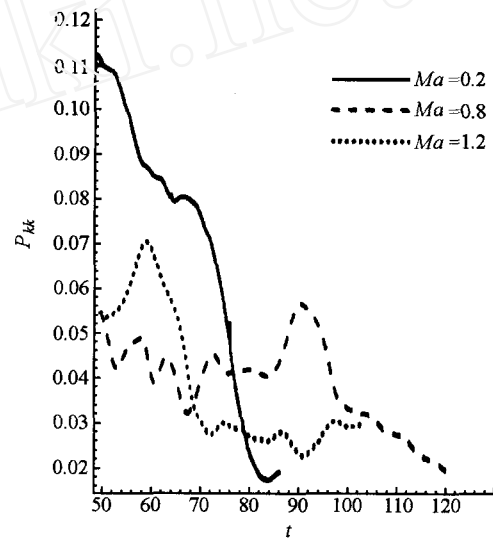


图7 P_{kk} 随时间 t 的变化

2.2 平面槽道湍流的直接数值模拟

采用基于非等距网格的五阶迎风紧致格式逼近不可压和可压 N-S 方程, 数值模拟了不可压和可压槽道湍流. 首先为验证方法数值模拟了不可压“二维槽道湍”网格点为 128×129 . 给出了 Re 为 6000 ~ 15000 的计算结果. 在 $Re \leq 10000$ 时, 与文献[22]中的结果一致(取同样点数). 结果表明, $Re \leq 9000$ 时流场随时间出现周期状态; $Re < 15000$ 时为拟周期状态; 当 $Re = 15000$ 时得混沌状态. 后者在文献[22]中“... 由于受数值精度所限未能给出...”. 这表明五阶迎风紧致差分格式的混淆误差比谱方法小.

我们进一步直接数值模拟了三维可压和不可压充分发展槽道湍流. 对于不可压流, 给出了包括脉动速度的偏斜因子及平坦因子等高阶统计矩的计算结果, 且与实验值附合甚好. 对可压流动得到了 $Ma = 0.8$ 时的充分发展湍流流场, 分析了可压缩性对壁湍流微尺度结构的影响. 通过与不可压情况的对比, 发现近壁相同位置处可压湍流的速度条带更加平整. 在图8中给出了可压和不可压槽道湍流近壁速度条带结构的比较. 通过对可压壁湍流流场中

能量输运和传递特征的分析指出, 压缩性效应导致瞬时压力在压缩-膨胀项的做功, 部分吸收了湍流脉动动能, 造成了速度条件结构的改变.

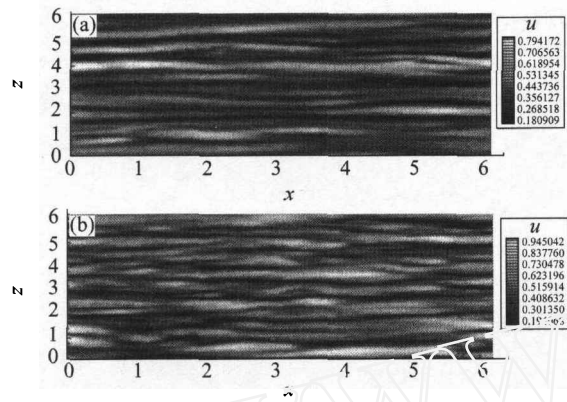


图8 槽道湍流在 $1 - |y| = 0.04$ 处的流向速度分布图
(a) 可压情况 $Ma = 0.8$; (b) 不可压情况

2.3 激波-涡干扰声场生成的数值模拟

在进行气动声场数值模拟时会遇到很多困难.

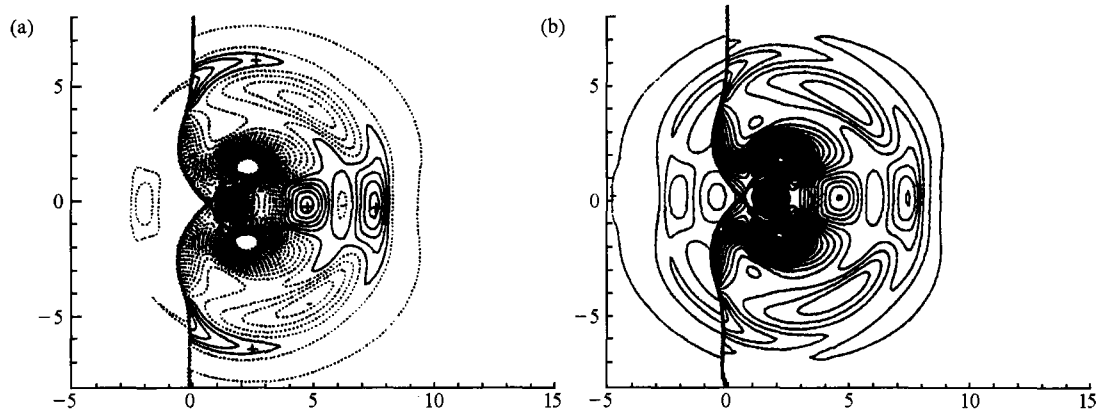


图9 涡-激波干扰 ($t = 5.0$) 时流动结构图
(a) 扰动压力 $\Delta p = (p - p_s) / p_\infty$ 等值线 $\Delta p > 0$ 为实线, $\Delta p < 0$ 为虚线; (b) 密度等值线

参考文献

- 1 Fu D X, et al. A high order accurate difference scheme for complex flow fields. *J Comput Phys*, 1997, 134: 1
- 2 Reynolds W C. The Potential and Limitation of Direct and Large Eddy Simulations, Lecture Notes in Physics 357. Lemley J L ed. Berlin: Springer-Verlag, 1989. 313~341
- 3 傅德薰, 等. 可压混合层流动转换到湍流的直接数值模拟. *中国科学, A 辑*, 2000, 30(2): 161
- 4 Rai M M, et al. Direct simulation of turbulent flows using finite-difference scheme. *J Comput Phys*, 1991, 96: 15
- 5 Lele S K. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *J Comput Phys*, 1992, 103: 16
- 6 Fu D X, et al. On efficiency and accuracy of numerical methods for solving the aerodynamic equations. In: Proc 3rd ISCFD, Michiru Yasuhara, et al. ed. Japan Society of CFD, 1989
- 7 Fu D X, et al. Upwind compact scheme and application. In: Proc 5th ISCFD, Daiguji, ed. Japan Society of CFD, 1993. 184~190
- 8 Tolstykh A I. The third order compact approximation for incompressible flows. In: Proc 3rd ISCFD, Daiguji, ed Japan Society of CFD 1: 283 1989, Nagoya
- 9 罗纪生, 等. 增强可压缩混合的一种方法. *中国科学, A 辑*, 2000, 30(11): 1033
- 10 Ma Y W, et al. Super compact finite difference method (SCFDM) with arbitrarily high accuracy. *Computational Fluid Dynamics Journal*, 1996, 5(2): 259
- 11 Fu D X, et al. Analysis of super compact finite difference method (SCFDM) and application for simulation of vortex-shock interac-

如, 声的传播是非定常的, 声能和主流能量差异巨大, 尺度的差异大, 传播距离长, 频率宽等. 由于计算域的有限性也给边界条件的处理带来一定困难. 在当前采用高精度方法是研究近场声源的一个重要手段.

文献[11]中利用六阶精度的超紧致格式模拟了由激波-涡干扰而产生的声场. 取网格点数为 601×601 (文献[23]中取 1044×1170). 初始时刻有一垂直激波, 涡自左向右运动. 涡波相遇改变了激波上游的流动参数, 促使激波变形, 从而导致先导四极子声的产生. 然后依次形成第二、和第三个四极子声. 图9中给出的是双涡与激波相互干扰在 $t = 5.0$ 时刻的压力差和密度等值线. 图9(a)中实线为 $(p - p_s) / p_\infty > 0$, 虚线为 $(p - p_s) / p_\infty < 0$. 对照压力和密度等值线可发现有接触间断, 从图中可以明显地看到二次间断线. 二次间断线并不总是激波, 这依赖于来流条件. 近场声源的直接数值模拟是研究产生噪声的机理及噪声控制的基础.

- tion. *Int J for Num Methods in fluids*, 2001 36: 773
- 12 Ma Y W, et al. Super compact finite difference method with uniform and non-uniform grid system. In: *Proc 6th ISCFD*, Hafez M, ed Lake Tahoe, 1995. 3: 135
- 13 Gamet L. Compact difference schemes on non-uniform meshes, application to direct numerical simulation of compressible flows. *Int J Num Methods in Fluids*, 1999, 29: 159
- 14 Li X L, et al. DNS of incompressible turbulent channel flow with upwind compact scheme on non-uniform meshes. *CFD J*, 2000, 8 (4): 536
- 15 Fu D X, et al. High resolution schemes. *Computational Fluid Dynamics Review*. 1995, Hafez M, et al. eds. Chichester: Wiley: 1995. 234~250
- 16 Fu D X, et al. Nonphysical oscillation in numerical solutions—reason and improvements. 1995, *CFD J*, 4(4): 427
- 17 Moser R D, et al. The effects of curvature in wall-bounded turbulent flow. *J Fluid Mech*, 1987, 175: 479
- 18 Fu D X, et al. Behaviour analysis of numerical solution and simulation of coherent structure in compressible mixing layer. 见: 庄逢甘主编. 北京计算流体力学讨论会文集. 1998. 10: 1
- 19 Moin P. Direct numerical simulation: A tool in turbulence. *Annu Rev Fluid Mech*, 1998, 30: 539
- 20 Spalart P R. Direct numerical simulation of a turbulent boundary layer up to $Re_\tau = 1410$. *J Fluid Mech*, 1988, 187: 1
- 21 Kim J, et al. Turbulence statistics in fully-developed channel flow at low Reynolds number. *J Fluid Mech*, 1987, 177: 133
- 22 Jimenez J. Transition to turbulence in two dimensional Poiseuille flow. *Phys Fluid*, 1987, 30: 265
- 23 Osamu Inoue, et al. Sound generation by shock-vortex interactions. *J Fluid Mech*, 1999, 380: 81

“我国生命科学研究中的伦理问题”学术讨论会在京举行

在朱作言院士等生命科学家的倡议下, 主题为“我国生命科学研究中的伦理问题”的香山科学会议, 于2002年4月17~19日在北京举行. 来自中国科学院、中国社会科学院、中国医学科学院、北京大学、复旦大学、上海社会科学院等单位的约40位生物学家、伦理学家、法学家、社会学家等专家学者参加了会议, 国家科学技术部、国家自然科学基金委员会和中国科学院等有关部门的管理专家也应邀出席了会议.

与会专家学者围绕3个中心议题进行了报告和发言, 并展开讨论. 研讨的中心议题是: 1. 中国与世界; 生命科学究竟带来哪些伦理和法律问题; 2. 生命科学研究中的伦理问题与科学家的社会责任; 3. 制定与生命科学相关的政策法规中的若干伦理问题. 专家学者们指出, 现代生命科学的突破和生物技术的进步不仅给农业、医疗、健康等领域带来革命性的影响, 而且使人类赖以生存的环境与价值观念面临严峻的挑战, 特别是转基因技术、克隆技术、人胚胎干细胞等生命科学和生物技术前沿领域的研究而引发的伦理和法律问题已成为全球普遍关注的热点之一. 在经济与科技全球化的今天, 我国同样面临着生命科学和生物技术发展所带来的伦理与法律问题. 但我国作为有着悠久文明史的、人口最多的发展中国家, 在政治体制、工业化程度、科学发展水平、宗教信仰、伦理道德观念以及文化背景等诸方面, 与其他国家存在着差异, 因此我们面临的问题又具有特殊性. 如何在国际社会有关生命伦理准则与法规的框架下, 充分考虑我国的国情, 深入探讨生命科学研究中的伦理和法律问题, 并为国家制定相关政策法规提出建议, 不仅是生命科学家的责任, 也是伦理学家、社会学家、法学家等相关领域的专家学者共同关心的问题.

经过广泛而深入的讨论, 专家学者在有关生命伦理的一些原则性问题上达成了共识, 一致认为: 科学家在进行科学研究中必须遵循科学技术服务于人类福祉的基本伦理原则; 我国科学家应当自觉与伦理学家、社会学家、法学家等一道, 以积极的姿态应对生命伦理带来的各种挑战; 我国政府应大力支持和促进生命科学的发展, 切实增强我国生命科学研究的实力, 坚决反对其他国家在生命伦理问题上采取双重标准.

与会专家学者还提出相关的政策建议, 如: 我国政府应及时对生命科学领域引发的伦理争论和法律问题做出反应, 制定相应法规并加大执法力度; 尽快成立全国性的和地方各级生命伦理委员会; 广泛开展生命伦理方面的讨论与教育.

(供稿: 龚 旭)