

离散 NS 方程熵增分析

李理¹, 陈哲¹, 李新亮¹

(1 中国科学院力学研究所高温气体动力学国家重点实验室, 北京海淀区 100190)

摘要 作者从能量守恒和熵增原理角度, 研究了离散形式下对流项和粘性项对熵的变化不同作用, 指出了在对流项处理得当的条件下, 粘性项的计算偏差是导致计算失稳的主要原因, 并提出了利用人工粘性弥补这一计算偏差的方法。作者以四阶中心基本离散格式为例, 说明了八阶人工粘性施加方法, 人工粘性项中的可调参数可以根据基础格式计算出的耗散与真实耗散的偏差确定。同时作者对可压缩 NS 方程及非均匀坐标系下熵增不足的原因进行的初步探究, 并提出了解决方案。可压缩平板流动 DNS 的计算表明, 利用人工粘性补充了熵增不足的部分以后, 计算更稳定, 可以有效避免非物理解的产生。

关键词 人工粘性, 湍流, 中心格式, 直接数值模拟, 可压缩

引言

通过数值模拟准确的预测复杂流动是当前航空、航天领域中迫切需要解决的空气动力学前沿问题之一^[1]。随着空气动力学理论不断完善, 计算机品质的不断提高, 湍流的数值模拟成为了数值预测提高气动性质的瓶颈问题。湍流数值模拟方法有: 直接数值模拟 (DNS)、大涡模拟 (LES) 及雷诺平均模拟 (RANS)。其中直接数值模拟和大涡模拟预测精度较高, 在研究非定常多尺度问题时, 应用极为广泛。

在进行 NS 方程的直接数值模拟 (DNS) 或者大涡模拟 (LES) 时, 需要尽可能的识别小尺度量, 这就要求计算中的数值粘性足够小, 以防止其将小尺度结构耗散掉。中心格式因没有耗散误差, 而成为了一种理想的离散格式, 如 LELE^[2] 提出并发展了紧致中心格式, 并将其应用在湍流的直接数值模拟当中。但由于中心格式离散对流项时, 计算中没有任何数值耗散, 无法抑制又对流项产生的混淆误差, 有可能导致计算中的总动能和熵的不守恒, 因此很多研究者对中心格式离散对流项做了很多工作来保证这一点。Jameson^[3] 利用中心格式加人工粘性的方法抑制振荡并捕捉激波; Blaisdell^[4] 和 Feiereisen^[5] 提出了能量守恒性格式, 提高了稳定性。Pirozzoli^[6,7] 对显式守恒型中心格式进行了一系列研究, 并使用完全没有耗散的中心型格式进行了平板边界层的数值模拟。

Honein^[8] 发展了熵守恒格式, 并利用熵方程代替能量方程求解可压缩 NS 方程。

在进行 NS 方程的数值求解时, 如果采用中心格式离散对流项, 这是计算中完全没有数值耗散, 那么流场中的数值振荡只能交给粘性项进行压制, 这就要求粘性项的计算必须足够精确, 以准确模拟 NS 方程中的耗散行为, 这在壁湍流里更为重要。Sandham^[9] 将粘性项分解成了 Laplace 非守恒形式, 将不可压中的主项提出来, 使用高精度方法离散。Shen^[10] 采用在守恒形式的粘性项的基础上, 使用和五阶 WENO 相同的模板构造了四阶的离散格式。这些格式已经被成功的应用在了直接数值模拟及大涡模拟当中, 取得了很好的效果。

国内外研究者对对流项和粘性项做了非常多的优秀的工作, 而使得使用中心格式进行 DNS 及 LES 成为现实, 但是在进行数值扰动较大的直接数值模拟或大涡模拟时, 使用无耗散格式仍会由于耗散不足而出现非物理解, 这种现象在空间发展的平板湍流边界层中尤为明显。因此我们有必要分析使用中心格式离散 NS 方程时产生耗散不足即熵增不够的原因, 并利用人工粘性来弥补这个缺点。

第一章将从能量守恒及熵守恒的角度, 利用傅里叶方法分析熵增不足的主要原因; 第二章提出利用人工粘性弥补这一不足的方法, 并以四阶格式为例, 给出了量化的人工粘性; 第三章通过一维扩散问题、三维各项同性湍流及槽道流动及平板边界层直接数值模拟验证了人工粘性的有效性。

1 中心离散 NS 方程的能量分析

1.1 中心格式离散对流项时的不稳定现象

在进行可压缩湍流的直接数值模拟时，因有限差分法的高精度，普遍采用其离散 NS 方程。NS 方程含有时间导数项、无粘空间导数项及粘性空间导数项，对于时间导数项多使用高阶龙格库塔法；对于粘性项的空间导数，一般采用中心格式离散；而对无粘空间导数，数值离散方法可分为迎风格式和中心格式。使用迎风格式离散无粘空间导数计算稳定，但会引入过多数值耗散，不利于识别小尺度结构；中心格式虽然计算不稳定，但因其完全没有引入数值耗散，成为了一种很有前途的离散方法。但是在实际应用中发现，当计算复杂问题，即使使用精心设计的中心格式，也很难保证数值稳定性，例如对转捩的进行直接数值模拟时，会发生转捩位置提前的现象，即出现了非物理解，如图 1。

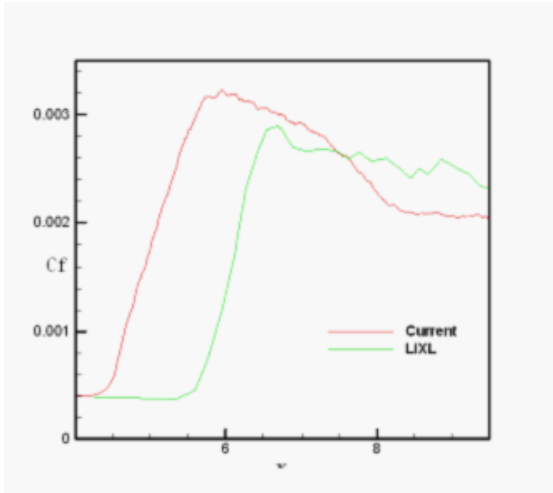


图 1: 绿线为 DNS 结果，红线为中心格式 DNS 结果

数值计算中出现非物理解的原因多是因为熵增不足，下面将从半离散形式不可压 NS 方程出发，分析产生这一现象的原因，并提出解决方法，并将其推广到可压缩方程及非均匀坐标系。

1.2 能量分析

在下面的分析中，我们将采用半离散形式的离散方程，即假设时间倒数的计算是精确的，只分析空间差分的性质。对于粘性项采用

标准的中心差分格式，对于对流项，使用 F 提出的能量守恒格式。

不可压 NS 方程如下：

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j}$$

对于不可压问题，能量方程和动量方程是解耦的，如果问题是绝热，那么动能的变化率就可以代表熵的增减快慢。那么我们假设三个方向都采用周期边界条件，对于物理问题，区域内的总动能变化应只和粘性耗散有关，其具体表达式为：

$$\frac{d}{dt} \int_V \left(\frac{1}{2} u_i u_i \right) dV = - \int_V 2\nu S_{ij} S_{ij} dV$$

其中 S 为应变率，

而对于离散形式的总动能变化的表达式为：

$$\frac{d}{dt} \sum_V \frac{1}{2} u_i u_i = - \sum_V 2\nu S_{ij} S_{ij}$$

两者形式相同，都不包含对流项，这就是说，使用中心格式离散对流项，是对总动能的变化率没有影响的。那么引起熵增不足的原因就只能是粘性项的离散方法。

2 保熵增人工粘性

2.1 二阶导数误差分析

对于不可压方程粘性项，一般采用中心差分离散，如果计算中仍然有耗散不足的问题，那么问题就出在粘性项的离散方式上，下面通过泰勒分析和傅里叶分析分别研究粘性项的性质。

首先以二阶中心格式为例，对其进行泰勒分析，具体形式为：

$$\frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{\Delta x^2} = \frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{1}{12} \frac{d^4 u}{dx^4} \Delta x^2 + \dots$$

从上式我们可以看出，二阶中心格式的截断误差中，主项是反耗散项，这也就是说，粘性项的中心离散会导致反耗散的截断误差，这也就是使用中心格式进行计算时产生熵增不足的原因。

对于以下方程，

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

他有精确的傅里叶级数解，

$$u_k(x, t) = \hat{u}(t) e^{ikx}$$

$$u_k(x, t) = \hat{u}(0) e^{ikx} e^{-k^2 t}$$

当对二阶导数进行中心差分离散时，我们也可以得到一个数值解，数值解和精确解的比较见图 2。

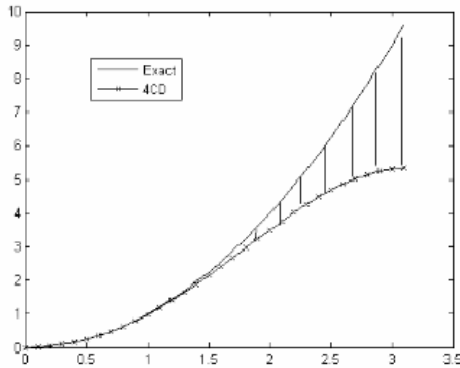


图 2：带 x 的线为数值解，实现为精确解

从中我们可以看出，数值解与精确解在高波数附近有很大的差距，这一个差距也就是分辨率不足时，产生熵增不足的原因。由于湍流是多尺度流场，一个小涡内的网格严重不足，高波数部分的耗散就会失真，这时候熵增不足就会非常明显。

从泰勒级数和傅里叶分析，我们找出了计算时熵增不足的主要原因，并且傅里叶分析也给出了量化的结果，可以供我们对格式进行改进。

2.2 保熵增人工粘性

上面指出的熵增不足问题实际上就归结到二阶导数的计算问题上，如果我们可以保证在所有波段，二阶导数计算出来的数值耗散都大于或者等于精确解，那就解决了熵增不足的原因。这样，一个直接的想法就是给粘性项施加高阶人工粘性，来弥补熵增不足。下面我们就以四阶格式为基本格式，介绍如何设计高阶人工粘性。

对于四阶格式的耗散曲线如图 2，在高波数范围内，四阶格式的耗散特性也是很差的，为了弥补这一误差，我们设计了一个八阶人工粘性，其表达式为

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{-(u_{i+2} + u_{i-2}) + 16(u_{i+1} + u_{i-1}) - 30u_i}{12\Delta x^2} - \alpha \times \frac{(u_{i+4} + u_{i-4}) - 8(u_{i+3} + u_{i-3}) + 28(u_{i+2} + u_{i-2}) - 56(u_{i+1} + u_{i-1}) + 70u_i}{\Delta x^2}$$

这个人工粘性可以直接应用在格式上，构成一个新的格式，其中含有一个自由参数，对于 DNS 和 LES 这个自由参数有不同的确定方法。对于 DNS，由于没有附加模型，这个参数的确定就要保证这个新的格式计算出的耗散在所有波段都大于或者等于精确解，以避免熵增

不足，此时系数的值为 1/60。而对于 LES，由于 SGS 模型也是耗散型，而且 SGS 的作业就是模拟高波数量及小尺度量，那么这个人工作粘性的目的并不是保证所有波段都有足够熵增，而是提高粘性项的分辨率，这样就可以选定某个波段范围，使这个波段分辨率最高，而高波数范围的耗散不足由大涡模拟模型来弥补此时系数的值为 1/120。两种情况下的耗散曲线如图 3。

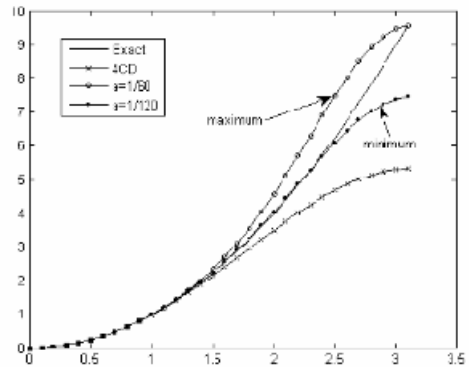


图 3：x 代表原始格式耗散曲线，实心点代表 LES 中 a=1/120 时的耗散曲线，空心圆圈代表 DNS 中 a=1/60 时的耗散曲线

本文提出的人工粘性的特点是它是和格式耦合在一起的，应用很方便，虽然人工粘性里有一个自由参数，但是这个参数只随格式的变化而变化，对于同一个基础格式，在 DNS 及 LES 中，参数都有一个定值，且这个值可以从理论上推导出来，对于不同的物理问题，只要格式不变，参数就不需要变化，这就大大简化了应用时的复杂性。

3 算例

3.1 一维扩散方程

设计本算例的主要目的是为了检验，在分辨率不足的情况下，二阶导数的计算是否会产生负耗散，从而产生熵增不足。

$$\text{一维扩散方程为：} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$$\text{初始条件：} T(x,0) = 100 \sin(x) \quad x \in [0, 3\pi]$$

边界条件：周期边界条件

图 4 展示了在 t=1 的时候，四阶中心格式，八阶中心格式以及四阶中心格式加人工粘性的结果（其中人工粘性系数取为 1/120，效果为优化分辨率并提供适当熵增）。

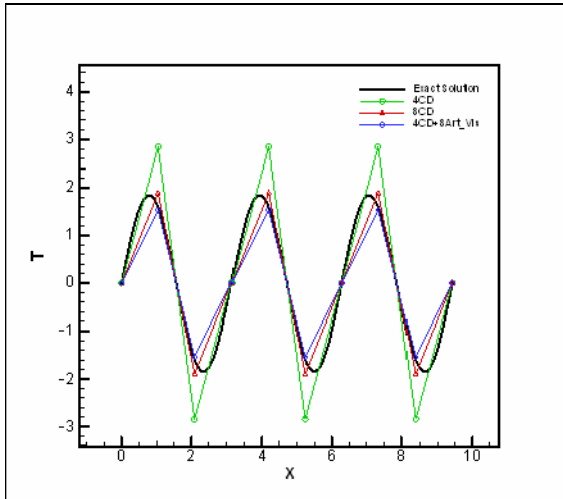


图 4: 绿线为四阶格式, 红线为八阶格式, 蓝线为四阶格式+人工粘性

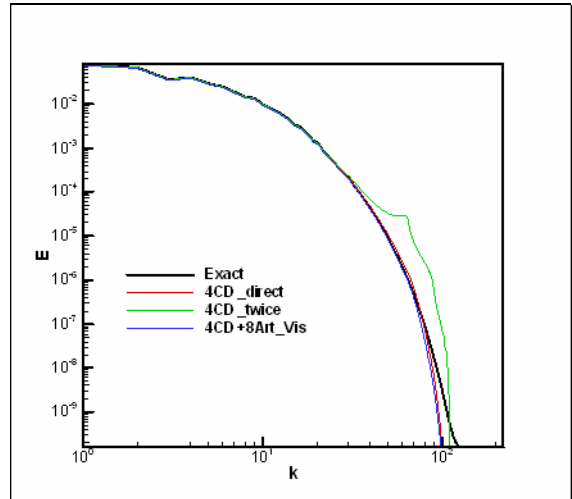


图 5: $t=1.5$ 时的能谱

结果表明, 普通的四阶中心格式和八阶中心格式都有耗散不足的缺点, 而采用了人工粘性以后, 可以弥补耗散不足这一缺点, 并且可以提高粘性项的分辨率, 计算效果会优于相同模板的八阶中心格式效果。

3.2 可压缩各项同性衰减湍流

下面我们将格式应用到三维问题中, 可压缩各向同性湍流的直接数值模拟这个算例是检验格式对小尺度量分辨率的很好的算例。计算区域设定为 $[0, 2\pi] \times [0, 2\pi] \times [0, 2\pi]$, 网格为 $128 \times 128 \times 128$ 的均匀网格。三个方向的边界条件均选用周期边界条件。初始时, 湍流马赫数为 $M_t = 0.2$, 泰勒雷诺数 $Re_\lambda = 72$ 。本文计算得到 $t=1.5$ 时的湍动能谱, 由于这个问题没有精确解, 我们把在更密的网格 $256 \times 256 \times 256$ 网格下, 利用九阶迎风+十阶中心格式的计算结果作为精确解与粗网格上的计算结果比较。

图 5 展示了普通的四阶中心格式与四阶中心+八阶人工粘性的结果, 其中绿线为对粘性项连续应用两次一阶导数求导的结果, 红线为直接用二阶导数求导的结果, 蓝线是施加人工粘性后的结果, 从图上可以看出, 四阶中心格式在高波数区的有耗散不足的现象, 导致高波数能谱高于精确解, 而使用人工粘性以后, 计算结果就得到了很好的改善。

3.3 可压缩槽道湍流

下面我们将格式应用到可压缩壁湍流的 DNS 中去, 工况为 Coleman^[11] 的工况, $Ma=3$, $Re_t=450$, 图 6 为速度剖面, 图 7 为脉动均方根, 图 8 及图 9 分别为条带结构和涡结构的可视化图像。

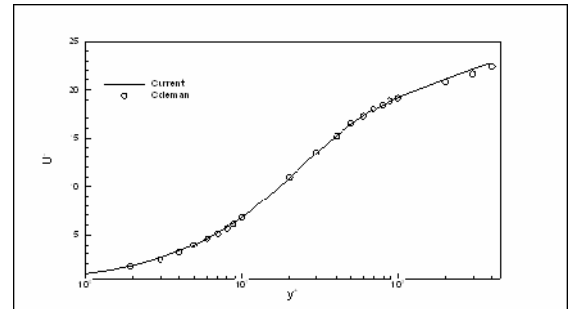


图 6: 平均速度剖面

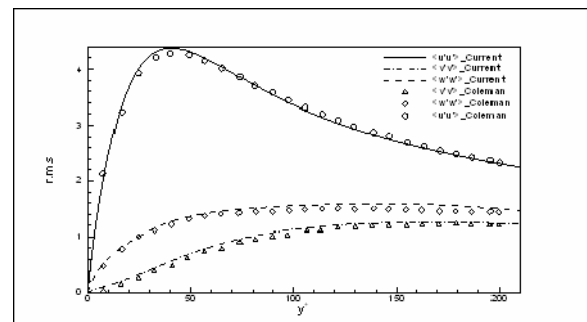


图 7: 速度脉动均方根

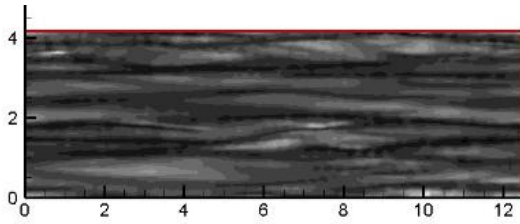


图 8: 条带结构

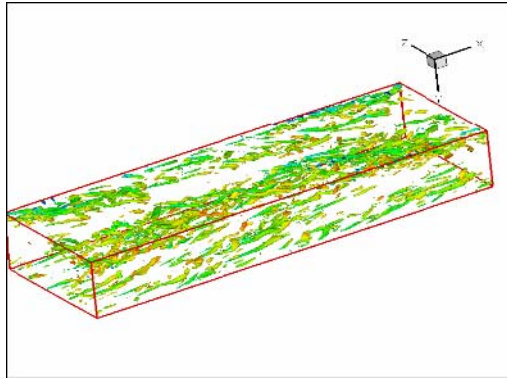


图 9: 涡结构

3.4 可压缩平板边界层的直接数值模拟

这个算例与 P 的算例类似，但是雷诺数较低，为 $3e5/\text{inch}$ ， Ma 为 3.0，图 10 及 11 分别为沿流向的摩阻变化曲线及沿法向的速度剖面与理论值的对比。

如果不添加人工粘性，这个算例会产生非物理解，转捩点大大提前，而施加了人工粘性以后，可以得到令人满意的结果。

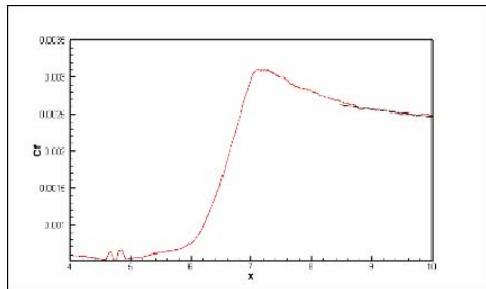


图 10: 摩阻曲线

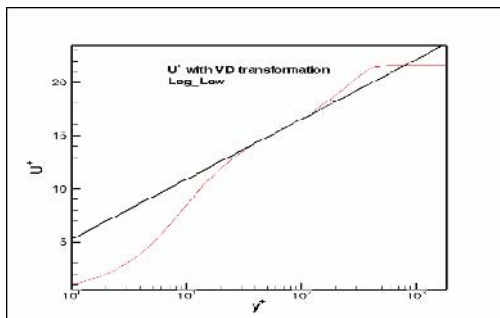


图 11: 8.8 处速度剖面

4 结论

本文通过对不可压 NS 方程进行能量分析，得出使用中心格式时计算中产生熵增不足的原因因为粘性项的计算偏差，并通过设计人工粘性来弥补这一熵增不足。设计出的人工粘性中的参数可以通过理论分析确定出来，可以在 DNS 中保证足够熵增且在 LES 中提高分辨率的作用。通过四个算例验证了人工粘性的效果，解决了使用中心格式计算复杂问题时产生非物理解的问题。

参考文献

1. 崔桂香, 许春晓, 张兆顺. 湍流大涡数值模拟进展[J]. 空气动力学学报, 2004, 22(2): 121-129.
2. Lele S K. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution[J]. Journal of Computational Physics, 1992, 103(1): 16-42.
3. Jameson A, Schmidt W, Turkel E. Numerical solutions of the Euler equations by finite volume methods using Runge-Kutta time-stepping schemes[J]. AIAA paper, 1981, 1259: 1981.
4. Blaisdell G A, Spyropoulos E T, Qin J H. The effect of the formulation of nonlinear terms on aliasing errors in spectral methods[J]. Applied Numerical Mathematics, 1996, 21(3): 207-219.
5. Feiereisen W J, Reynolds W C, Ferziger J H. Numerical simulation of a compressible homogeneous, turbulent shear flow[J]. 1981.
6. Pirozzoli S. Generalized conservative approximations of split convective derivative operators[J]. Journal of Computational Physics, 2010, 229(19): 7180-7190.
7. Pirozzoli S. Stabilized non-dissipative approximations of Euler equations in generalized curvilinear coordinates[J]. Journal of Computational Physics, 2011, 230(8): 2997-3014.
8. Honein A E, Moin P. Higher entropy conservation and numerical stability of compressible turbulence simulations[J]. Journal of Computational Physics, 2004, 201(2): 531-545.
9. Sandham N D, Yee H C. Entropy splitting for high order numerical simulation of compressible turbulence[M]//Computational Fluid Dynamics 2000. Springer Berlin Heidelberg, 2001: 361-366.
10. Shen Y, Zha G, Chen X. High order conservative differencing for viscous terms and the application to vortex-induced vibration flows[J]. Journal of Computational Physics, 2009, 228(22): 8283-8300.
11. Coleman G N, Kim J, Moser R D. A numerical study of turbulent supersonic isothermal-wall channel flow[J]. Journal of Fluid Mechanics, 1995, 305: 159-184.

Analysis of entropy production in discrete NS equations

Li Li¹, Chen Zhe¹, Li Xinliang¹

(1 Key Laboratory of High Temperature Gas Dynamics, Institute of Mechanics, C A S, No.15 Beisihuanxi Road, Beijing 100190, China)

Abstract: Based on energy balance, different role of convective terms and viscous terms is analyzed in discrete sense using Fourier tool. It is pointed that viscous terms are the main factors to introduce oscillation if the convective terms are treated properly. A class of high order artificial viscosity method is proposed to suppress oscillation. The implementation of 8th order artificial viscosity is explained as an example. The coefficient of this artificial viscosity can be estimated by theoretical method. A kind of principle of determine the coefficient is also presented. Four numerical examples are performed to illustrate the superiority of this method, including 1 dimensional diffusion problem, 3 dimensional compressible homogeneous isotropic turbulence, hypersonic channel flow and spatially developing supersonic boundary layer flow. The results show that the artificial method own high robustness and accuracy and non-physical solution can be excluded.

Key words: artificial viscosity, central scheme, turbulence, DNS, compressible