

非结构网格计算格式研究 及环境湍流模拟

华祖林 邢领航 顾 莉 褚克坚 著



科学出版社

www.sciencep.com

非结构网格计算格式研究 及环境湍流模拟

华祖林 邢领航 顾 莉 褚克坚 著

科 学 出 版 社

北 京

内 容 简 介

本书对基于有限体积法下压力校正法的非结构网格数值计算格式的性能进行了探讨,首先针对对流项离散格式,对高阶的 Q-QUICK 和 NQ-QUICK 格式来综合研究在非结构网格下的网格独立性能、收敛性能、计算精度以及 CPU 耗时等,并与一阶迎风格式(UDS)、中心差分格式(CDS)、混合格式(HDS)、幂率格式(PDS)等进行了比较;其次分别对方向导数法、格林函数法、仿动量插值法或正交校正法、法向导数法、简化法向导数法、最小校正法、超松弛校正法或梯度复合法等七种扩散通量计算方法进行了比较,包括计算精度、对网格变形的适应能力、收敛速度以及 CPU 耗时等。本书还将非结构网格优选的组合计算格式应用到实际环境湍流的模拟中,并推导建立了新的水深平均二维显格式代数应力模型(DEASM);提出了一种改进的三维显格式主动标量通量代数应力模型(EASFM),以非结构网格对三维分层剪切绕流案例进行了数值模拟计算。

本书可供从事环境水利、环境工程、水动力与水环境模拟、计算水力学等领域的科研人员阅读,亦可供大专院校、相关专业的高校教师、研究生作参考用书。

图书在版编目(CIP)数据

非结构网格计算格式研究及环境湍流模拟 / 华祖林等著. —北京:科学出版社, 2010

ISBN 978-7-03-028526-3

I. ①非… II. ①华… III. ①网格-计算方法-应用-湍流-数值模拟
IV. ①O243②O357.5

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2010)第 152903 号

责任编辑:沈 建 / 责任校对:陈玉凤

责任印制:赵 博 / 封面设计:耕者设计工作室

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

中国科学院印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2010 年 8 月第 一 版 开本:B5(720×1000) 1/16

2010 年 8 月第一次印刷 印张:13 1/4

印数:1—2 000 字数:256 000

定价:60.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

前 言

对水流及污染物在水体中的输运研究,数值模拟一直是其有力的手段。近年来,贴合几何边界能力极强的非结构网格在水动力及水环境数值模拟中得到了越来越广泛的应用,并逐渐成为环境水力模拟中的主流方法之一。非结构网格不仅大大增强了计算网格对复杂自然几何边界的贴合能力,提高了单元剖分的灵活性和采用网格形状的任意性,而且还使得程序在通用性和扩展性方面显著提高。但是由于非结构化网格几何拓扑结构的复杂性,一些在结构网格下比较成熟的高阶格式难以直接使用,因此探索非结构网格下计算精度较高、数值稳定性能良好的水流及污染物输运计算格式是一项十分迫切与有意义的工作。

本书基于有限体积法和 SIMPLE 类算法对非结构网格下水流及物质输运模拟中的高精度计算格式作了较为深入的研究,将高阶的 Q-QUICK 和 NQ-QUICK 格式与一阶迎风格式(UDS)、中心差分格式(CDS)、混合格式(HDS)、幂率格式(PDS)在非结构网格上的数值性能进行了探讨;比较了方向导数法、格林函数法、仿动量插值法或正交校正法、法向导数法、简化法向导数法、最小校正法、超松弛校正法或梯度复合法等七种扩散通量计算方法;还将优选的非结构网格组合计算格式应用到实际环境湍流的模拟中,同时推导建立了水深平均的二维显式代数应力模型(DEASM);提出了一种改进的三维显式主动标量通量代数应力模型(EAS-FM)。本书主要内容包括:

(1) 第 1 章,基于非结构网格以有限体积法构建了 SIMPLE 类算法通用离散方程式,给出了 Q-QUICK 和 NQ-QUICK 两种用于非结构网格下对流项计算的高阶格式;介绍了七种扩散项通量计算方法:方向导数法、格林函数法、仿动量插值法或正交校正法、法向导数法、简化法向导数法、最小校正法、超松弛校正法或梯度复合法等,此外还推导了各种法向导数计算方法下对应的非齐次 Neuman 边界条件的实施过程。

(2) 第 2 章,首先从二维和三维方腔流入手,综合研究 Q-QUICK 和 NQ-QUICK 两种格式在非结构网格下的网格独立性能、收敛性能、计算精度以及 CPU 耗时,并与一阶迎风格式(UDS)、中心差分格式(CDS)、混合格式(HDS)、幂率格式(PDS)等进行了比较。紧接着从污染物的对流扩散输运问题出发,进一步分析了这两种高阶计算格式在对流扩散方程中的数值特性。最后将该高阶格式应用于渐扩流和圆柱绕流中,并对计算的结果进行了分析和比对。

(3) 第 3 章,采用二维、三维泊松方程算例和二维、三维方腔流算例以及污染

物的对流扩散算例分别对七种法向导数计算方法进行了较为详细的数值性能比对,包括计算精度、对网格变形的适应能力、收敛速度以及 CPU 耗时等。

(4) 第 4 章,针对多种压力校正算法,在二维均分斜交网格、二维非结构网格以及三维非结构网格下分别讨论了它们对不同角度的均分斜交网格的适应能力、速度和压力欠松弛系数的适应能力、收敛下的迭代次数以及 CPU 耗时,并通过分析比对,探讨了各种压力校正算法的优劣性。

(5) 第 5 章,将非结构网格优选的组合计算格式应用到实际二维浅水流的模拟中,推导了新的水深平均的二维显格式代数应力模型(DEASM),采用非结构网格分别对丁坝绕流、湄洲湾潮流和污染物输运进行了模拟。

(6) 第 6 章,提出了改进的三维主动标量通量显式代数表达式,建立了考虑浮力各向异性效应的显式代数应力通量模型(EASFM),并应用非结构网格模拟计算了三维温分层剪切绕流。

本书得到国家自然科学基金项目(50679019 和 50979026)、国家重点基础研究发展计划(2008CB418202)、中央高校基本科研业务费专项和长江科学院基金(YWF0905 和 YWF0901)的部分资助,在此表示感谢。

由于作者水平有限及时间仓促,再加上非结构网格计算本身的复杂性及测试案例的局限性,本书难免存在不妥之处,盼请读者批评指正。

作 者

2010 年 5 月于南京

目 录

前言

第 1 章 基于非结构网格 SIMPLE 类算法数值计算格式	1
1.1 研究进展	1
1.1.1 不可压流的求解方法	1
1.1.2 非结构网格下的数值通量算法	5
1.2 基于 SIMPLE 类算法的非结构网格数值计算格式	7
1.2.1 基本方程	7
1.2.2 通用方程离散	7
1.2.3 压力校对方程(SIMPLE、SIMPLEC 算法)	21
1.2.4 边界条件	25
1.2.5 线性方程组求解	26
参考文献	28
第 2 章 非结构网格下对流项离散格式的数值性能研究	34
2.1 方腔流算例	34
2.1.1 二维 90° 方腔流算例($Re=1000$ 和 $Re=3200$)	35
2.1.2 二维 30° 斜方腔流算例($Re=1000$)	41
2.1.3 二维方腔流算例	45
2.2 污染物的对流扩散算例	53
2.2.1 二维对流扩散方程算例	53
2.2.2 三维对流扩散方程算例	56
2.3 渐扩流算例	59
2.4 圆柱绕流算例	61
2.4.1 二维圆柱绕流算例	61
2.4.2 三维圆柱绕流算例	64
参考文献	67
第 3 章 非结构网格下各种扩散项梯度计算方法的综合数值性能比较	70
3.1 泊松方程算例	70
3.1.1 各种校正方法下的泊松方程离散形式	70
3.1.2 二维泊松方程算例	72
3.1.3 三维泊松方程算例	78

3.2 不可压方腔流算例·····	80
3.2.1 不同校正方法下的不可压 N-S 方程离散形式·····	80
3.2.2 二维方腔流算例·····	92
3.2.3 三维方腔流算例·····	97
3.3 污染物的对流扩散算例·····	99
3.3.1 二维对流扩散方程算例·····	100
3.3.2 三维对流扩散方程算例·····	103
参考文献·····	105
第4章 非结构网格下多种压力校正算法及其对速度和压力欠松弛系数的影响研究 ·····	107
4.1 多种压力校正算法·····	107
4.2 二维结构化网格·····	109
4.2.1 各种压力校正算法在 $Re=100$ 的 $15^\circ\sim 165^\circ$ 斜方腔流中的优劣性能比较·····	109
4.2.2 各种压力校正算法在 30° 斜方腔流下对速度欠松弛系数的影响·····	114
4.2.3 各种压力校正算法在 $Re=100$ 和 $Re=1000$ 的 30° 斜方腔流下对压力欠松弛系数的影响·····	117
4.3 二维非结构化网格·····	120
4.3.1 各种压力校正算法在 30° 斜方腔流下对速度欠松弛系数的影响·····	120
4.3.2 各种压力校正算法在 30° 斜方腔流下对压力欠松弛系数的影响·····	124
4.4 三维非结构化网格·····	128
4.4.1 各种压力校正算法在三维方腔流下对速度欠松弛系数的影响·····	128
4.4.2 各种压力校正算法在三维方腔流下对压力欠松弛系数的影响·····	132
参考文献·····	135
第5章 非结构网格下浅水流及污染物输运模拟 ·····	137
5.1 浅水流水深平均的湍流模型·····	137
5.1.1 水深平均的定义和简化假定·····	137
5.1.2 水深平均的混合长模型·····	138
5.1.3 水深平均的 $k-\epsilon$ 模型(DKE)·····	139
5.1.4 水深平均的代数应力模型(DASM)·····	140
5.1.5 水深平均的显格式代数应力模型(DEASM)·····	141
5.1.6 方程统一的离散形式·····	145
5.1.7 水位校对方程·····	148
5.2 丁坝绕流数值模拟·····	151
5.2.1 基本方程·····	151

5.2.2	边界条件	151
5.2.3	初始条件	154
5.2.4	计算结果	155
5.3	湄洲湾潮流及污染物输运的非结构网格数值模拟	165
5.3.1	湄洲湾潮流模拟	166
5.3.2	湄洲湾污染物输运模拟	170
	参考文献	175
第 6 章	改进的显式代数应力通量模型及其三维非结构网格模拟	177
6.1	引言	177
6.2	显格式代数应力通量模型进展简述	178
6.2.1	雷诺应力显格式代数应力模型进展	178
6.2.2	标量通量显格式代数应力模型进展	179
6.3	改进的显格式代数应力通量模型	180
6.3.1	显格式雷诺应力的代数表达式	180
6.3.2	改进的显式主动标量通量代数表达式的导出	185
6.4	显式代数应力通量模型的三维非结构网格模拟	189
6.4.1	基本方程	189
6.4.2	边界条件	191
6.4.3	数值求解	192
6.4.4	剪切温分层流和剪切温分层绕流算例计算	192
	参考文献	201

第 1 章 基于非结构网格 SIMPLE 类算法 数值计算格式

在环境水力学问题研究中,数值模拟已经成为研究水体流动及物质运输的一种极为重要的手段。相对于物理模型和现场试验而言,它在时间和费用上均占有很大的优势,因此得到了越来越广泛的应用。近些年来,随着数值求解技术的日臻完善和计算机技术的飞速发展,非结构化网格在水动力及污染物输运模拟中备受瞩目。由于非结构化网格在单元剖分上非常灵活,网格形状也不受限制,因而在贴合复杂几何边界的能力上显示出非常强大的优势。

目前,水流及物质输运模拟的数值方法常用的有有限差分法、有限元方法、有限体积法、有限分析法、特征线法等。其中有限体积法源自表达流体运动守恒规律的守恒型方程的数值求解,其优点是在一个控制体内进而在整个计算域内,所有的物理量均满足积分守恒的性质,不存在守恒误差,并且能正确计算间断。此外,有限体积法既能体现有限元法的几何灵活性又能发挥经典有限差分法的效率和守恒性,特别是结合非结构网格计算,能够使得程序在通用性和扩展性方面明显增强,提高了计算模拟精度,并且在一定程度上克服了计算过程中的非线性干扰。因此,非结构网格的有限体积法已经成为环境水力学数值模拟的主流方法之一,并在水流及物质输运问题的计算中发挥了重要的作用。本章将结合 SIMPLE 类算法着重介绍有限体积法下的非结构网格数值计算格式。

1.1 研究进展

1.1.1 不可压流的求解方法

水流及物质输运问题一般所涉及的流动往往是黏性不可压缩的,这便带来连续性约束条件难以满足的困难,特别是对于复杂流动问题,如果连续性条件满足得不好,计算误差在计算过程中会迅速地扩散而导致整个计算失败,即使得到稳定解也不易保证结果的合理性。因而黏性不可压缩 Navier-Stokes 方程组的各种解法都是以如何满足连续性约束条件为中心的。目前,这个方程组的解法有压力校正法、涡量流函数法、压力 Poisson 方程法、人工压缩性法和分步法等。压力校正法通过连续方程的离散式建立了压力修正方程,方程中包含一个满足连续性方程的修正项。涡量流函数法通过引入流函数自动满足连续性条件,对于二维流动,涡量

流函数法是简单方便的,但很难将其推广到三维。压力 Poisson 方程法用 Poisson 型的压力方程代替连续性方程,将压力的求解和满足连续性条件联系在一起。人工压缩性法则利用一个含人工压缩项的连续性方程代替原不可压连续性方程,通过时间推进得到满足连续性条件的稳态解,这种方法在计算定常解时才比较有价值。分步法将 Navier-Stokes 方程组进行时间分裂,引入中间速度,然后用压力场对此中间速度场进行修正,最终得到满足连续性方程的速度场。以上这些算法各有优缺点,但以压力修正算法的应用最广。压力修正算法源由 Patankar 与 Spalding^[1]提出的 SIMPLE (semi-implicit method for pressure-linked equations algorithm)算法,他们开创性的工作使 SIMPLER^[2]、SIMPLEC^[3]和 PISO^[4]等一系列算法于 20 世纪 80 年代初期相继问世。这些算法都是利用质量守恒方程使假定的压力场通过不断地迭代过程而得到改进。

1. 结构网格下的 SIMPLE 类算法

SIMPLE 类算法在交错网格中,速度分量和压力储存在交错的位置上,因此可有效地剔除不合理的压力场^[5~10],但交错网格的数据存储繁琐,边界也不易处理,无论是程序的编制还是数值计算都要比同位网格费时,同时对网格的局部加密也显得不够经济,另外,当采用多重网格法来加速迭代收敛时,交错网格也显示出明显的不足。近年来,许多学者提出了同位网格系统,其思想是将所有变量都存储在上一网格节点上。这种方法相比于交错网格优势明显,表现在变量存储简便,离散形式简洁,运算速度较快,对内外边界的处理也变得简单,网格加密的处理也容易实现。有关同位网格和交错网格的优劣性能比较可参见文献^{[11]~[17]}。虽然同位网格具有明显的优势,但会发生速度和压力振荡的现象,这将导致某些情况下数值解的不稳定性。针对同位网格离散时出现的这些现象,Rhie 和 Chow^[18]提出了特殊的动量插值方法去计算控制容积界面上的速度,插值的途径是从界面两边相邻节点的离散的动量方程入手,将界面流速与相邻节点的压力耦合起来以消除速度和压力场的振荡,防止了不合理的压力场的出现。Peric 等^[11]利用这种动量插值思想分别对交错网格和同位网格下的二维不可压缩流进行了计算,发现同位网格在收敛速度上至少不亚于交错网格。Majumdar^[19]通过研究发现动量插值方法所得到的收敛解与松弛因子有关,并提出了一种改进措施。Miller 等^[12]、Rodi 等^[20]、Kobayashi 等^[21]也提出过消除松弛因子影响的方法。Thiart^[22, 23]提出通过差分格式引入两个节点的压力差来防止不合理的压力场并将其拓展到了柱坐标^[24]中。Date^[25, 26]的方法是在处理压力梯度时引入相邻两点间的压力差,并拓展到了可压缩流动^[27]。Papageorgakopoulos 等^[28]对线性假设下的 Rhie 和 Chow 动量插值方法进行了改进,利用 QUICK 格式对界面流速进行二次插值,并提出了精度更高的 QMIM 动量插值方法。Choi^[29]发现利用 Rhie 和 Chow 的动量插值

方法时间步长也会对收敛下的流速产生一定的影响,进而提出了包括体积力、欠松弛因子和时间步长的完整的界面流速插值形式,并通过数值试验指出这样的插值方式是独立于时间步长的。Yu 等^[30]指出 Choi 的动量插值方式也并非和时间步长无关,庆幸的是时间步长对收敛下的流速值影响很小,甚至可以忽略。此外,文中还指出结合 SIMPLE 算法下的 Rhie 和 Chow 动量插值方法在相对较低的欠松弛系数或者相对较小的时间步长下容易产生“棋盘状”的压力分布,其他的 SIMPLE 类算法以及 PISO 算法同样会出现这样的问题。此后, Yu 等^[31]还提出了两种精度更高的动量插值方式,并指出这两种插值方式与时间步长和欠松弛因子无关,此外文献^[26]中分析认为动量插值只是一种更一般的插值方法的特例。从保证速度与压力不失耦的角度而言,只要引入了压力修正方程的五点格式及压力修正方程中源项计算时采用动量插值,即可把不合理的压力场分辨出来,因而 Nie 等^[32]确定动量离散方程系数的界面流速,即使采用线性插值方式也无妨。Wang 等^[33]曾设想只要在流场求解过程中的某一环节中能引入与所计算的流速有关的相邻两点间的压差,则速度与压力间的失耦问题便可以解决,无论这一压差是在哪一步计算或是以什么方式引入的。李增耀等^[34]提出了一种简化的同位网格方法,动量插值只用于计算压力修正方程中的界面流速,而在动量方程中,界面流速的计算仍采用线性插值。本文在陶文铨^[10]等工作的基础上,对实施同位网格方式作了进一步总结归纳,见表 1.1。由表 1.1 可见,在所归纳的 8 种方式中,对连续方程的离散形式做了特殊的处理以导出压力修正方程的五点格式(二维问题)是共同采用的用以克服失偶现象的主要措施。

表 1.1 同位网格不同实施方式的比较

方 案	引入压差的环节				算法特点	文 献
	界面流速 (确定系数)	界面流速 (连续性方程)	压力梯度 的离散	对流项 格式		
1	采用动量插值引入相邻点压差	采用动量插值引入相邻两点间压差	采用中心差分,未引入压差	常规格式,未引入压差	SIMPLE 算法	[18]
2	由节点速度线性插值未引入压差	采用动量插值引入相邻两点间压差	采用中心差分,未引入压差	常规格式未引入压差	SIMPLE 算法	[34]
3	由节点速度线性插值未引入压差	引入压差,形成压力修正值的五点式	采用特殊的压力梯度插值方法,引入压差	常规格式,未引入压差	SIMPLE 算法	[25]

续表

方 案	引入压差的环节				算法特点	文 献
	界面流速 (确定系数)	界面流速 (连续性方程)	压力梯度 的离散	对流项 格式		
4	由节点速度线性插值未引入压差	采用特殊插值方法,得出压力校正方程的五点式	采用中心差分,未引入压差	常规格式,未引入压差	①类似于SIMPLE算法 ②将压力校正分解为质量守恒的平均部分和分布光滑的光顺部分	[26]
5	采用类似于动量插值方式引入压差	采用类以于动量插值方式,导出压力校正方程的五点格式	采用中心差分,未引入压差	在对流项中引入相邻两点间的压差	①对外节点区域离散方法导出 ②类似于SIMPLE算法	[22] [23] [24]
6	由节点速度线性插值未引入压差	采用类以于动量插值方式,导出压力校正方程的五点格式	采用中心差分,未引入压差	在对流项中引入相邻两点间的压差	①对内节点区域离散方法导出 ②类似于SIMPLE算法	[33]
7	由节点速度线性插值未引入压差	采用类以于动量插值方式,导出压力校正方程的五点格式	采用中心差分,未引入压差	常规格式未引入压差	SIMPLE算法	[32]
8	采用节点速度高次插值引入相邻点间压差	采用类以于动量插值方式,导出压力校正方程的五点格式	采用中心差分,未引入压差	QUICK格式,未引入压差	类似于SIMPLE算法	[28] [31]

2. 非结构网格下的 SIMPLE 类算法

非结构化网格可以采用任意形状的单元格,单元边的数目也无限制,因此能够很好地模拟自然几何边界,非常便于进行网格的自适应。尤其是结合有限体积法的非结构化网格实施,使得程序在通用性和扩展性方面明显增强,因此越来越多地受到研究者们的关注。在 20 世纪末,非结构化网格 SIMPLE 类算法被推广到的不可压缩流场计算中。Taniguchi 和 Kobayashi^[35]采用 Voronoi 图作为有限控制体积的网格系统,以压力为直接求解变量计算了二维不可压缩流动。Hwang^[36]和

Thomadakis 等^[37]提出了在交错非结构化网格上求解二维不可压缩层流的 SIMPLE 算法,压力位于三角形单元的中心,速度分量位于三角形的顶点。Jiang 等^[38]、Athavale 等^[39]提出了一种混合非结构化网格上不可压缩流动和可压缩流动的 SIMPLE 算法。Davidson 等^[40,41]给出了在同位非结构化网格上的二维不可压缩层流的 SIMPLEC 算法,所有的求解变量均位于三角形的中心。Mathur 和 Murthy^[42]对非结构化有限体积法进行了研究,对流项采用重构梯度的一阶迎风格式,计算了腔体驱动流和腔体内自然对流问题。Sheng 和 Chen^[43]将 Jiang 等的方法推广到非定常流动的数值计算。相关的研究还有不少,这里不再列举。但总的来说,非结构网格下的 SIMPLE 类算法还不够成熟,探寻更为高效稳定的算法是非常有必要的,也是比较前沿的研究课题。本书在第4章中对这方面的问题做了进一步有益的尝试,旨在为实际水流及物质输运过程中的非结构网格模拟选择合适的 SIMPLE 类算法起到一定的指导作用。

1.1.2 非结构网格下的数值通量算法

构造适合于非结构网格下的高精度计算格式一直是研究者们非常关注的热点问题。但在应用非结构网格计算对流项通量和扩散项通量时,不仅会存在沿控制体积交界面的法向扩散(normal diffusion),同时也存在交叉扩散(cross-diffusion)。对于前者,我们可以通过改进对流项计算格式来降低假扩散误差,提高模拟精度;对于后者,需要借助良好的法向梯度校正算法,以提高扩散项通量的估算精度。下面就这两种通量算法作简要介绍。

1. 对流通量算法

目前,在流向扩散的格式构造方面,主要有以下两条途径。

第一种途径是将结构化网格上的格式直接推广于非结构化网格。一些常用的差分格式可以很方便的应用于非结构网格中,如一阶迎风格式(UDS)、混合格式(HDS)、幂率格式(PDS)^[44]、指数格式(LEDs)^[45]、二阶中心差分格式(CDS)等。但是一阶迎风格式会带来严重的数值耗散,在实际应用中越来越少,HDS、PDS、LEDs 具有较好的稳定性,但是在精度方面难以让人满意,而 CDS 在数值上是不稳定的。一些比较成熟的高阶迎风插值格式,如 QUICK^[46]、QUADSE/QUADSER^[47]等,包括近年来出现的一些基于对流有界准则的低数值耗散、守恒、非振荡的高分辨率格式,如 STOIC 格式^[48]、COPLA 格式^[49]和 GAMMA 格式^[50]等,由于有着比一阶迎风格式更高的精度,可有效降低假扩散的影响,又有着较好的对流稳定性,因而在结构化网格中得到了广泛的应用,其中 QUICK 还被较为普遍地纳入各种商业软件中。但遗憾的是,这些优良的数值格式在非结构网格中却难以直接使用。因为在离散对流项时,除了使用最近上游单元处的变量值以外,还需要远上

游附加点处的变量值,而远上游附加点的位置在非结构化网格系统中是不确定的,需要在流场计算过程中搜寻,因此造成这些方法的缺点是格式不紧凑,需要另外计算与存储附加结点的信息,从而极大地增加了程序的复杂性。

第二种途径是梯度重构法。它的基本思想是根据 Taylor 多项展开式,构造插值结点处的变量值和梯度值,而梯度值由邻近单元的变量值重构得到。这种方法的优点是格式紧凑,便于向更高阶差分格式推广。梯度重构法在非结构化网格上实施的关键在于如何确定上游的梯度值且能保持格式的有界性。关于这方面的研究,已经有一些成果出现,如 Aftosmis 等^[51],Mathur 和 Murthy^[42],Carl 等^[52]等。但大多数研究集中在对流项梯度重构的低阶迎风格式方面,高阶梯度重构还鲜有报道。虽然一些满足对流有界准则的高分辨率格式在结构网格下具有优良的数值性能^[50,53,54],但这类繁琐的格式在非结构网格中难以直接应用,梯度重构工作量亦较大,因此在实际应用中受到很大的限制。从经济性和适用性上看,高阶迎风插值格式相对比较简洁。Davidson^[40]曾提出了一种适合于非结构网格应用的改进 QUICK 格式,但并未对该格式作数值性能的研究,在以后十来年的发展中也鲜有文献做相关方面的报道。为此作者在第 2 章中对这方面专门做了有益的尝试和探讨。

2. 扩散通量算法

在降低非结构网格下交叉扩散项的耗散方面,也有许多的成果面世。降低交叉扩散项耗散的关键是如何提高法向梯度估算的精度,目前在这方面的方法主要有:方向导数法^[55]、格林函数法^[56]、仿动量插值法^[57,58]、法向导数法^[59,60]、简化法向导数法^[61]、最小校正法(minimum correction approach)^[57]、超松弛校正法(over-relaxed approach)^[57]、梯度复合法^[62]等。上述方法的稳定性和精度各有不同,关于它们在数值性能方面的比较也有一些相关文献的报道,如 Jasak^[57]指出仿动量插值法、最小校正法和超松弛校正法中,超松弛校正法具有较高的精度和数值稳定性,并在二维纯扩散方程中通过数值试验加以证实;徐明海^[61]通过恒定流下的热能输运方程对上述部分方法进行了比较,并指出法向导数法具有最高的精度,而简化法向导数法在不失精度的情况下更合适于实际中的应用。虽然前人在法向梯度的计算方法上做了有益的探讨,并得出了一些结论,但是更为详细的综合数值性能比较仍需要补充和完善,尤其在不可压二维、三维流动计算中,各种算法的性能还有待进一步重新评估。这方面工作的开展可以更好地提高计算的稳定性和经济性,从而为选择合适的扩散通量计算方法提供依据。本书在第 3 章进行了这方面的探讨研究。

1.2 基于 SIMPLE 类算法的非结构网格数值计算格式

本节从有限体积法(FVM)出发,建立了水流及物质输运模拟中适合于非结构网格计算的高阶对流项计算格式,同时结合非结构网格下交叉扩散项的处理方法建立了基于动量插值思想下的 SIMPLE 类算法,建立了通用的不可压流方程离散形式,推导了各种法向导数算法对不同计算边界条件下的处理方法。这些工作为后续章节的深入研究做好了必要的准备。

1.2.1 基本方程

守恒型的不可压缩流动的连续方程和动量方程分别为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j u_i)}{\partial x_j} = \rho f_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (1.2)$$

式中: u_i 为不同方向的流速分量; ρ 为流体密度; p 为压强; μ 为动力黏滞系数; f_i 为外力。

将式(1.1)、式(1.2)写成通用微分方程的形式

$$\frac{\partial(\rho \phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \phi) = \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi) + S_\phi \quad (1.3)$$

式中: ϕ 为通用变量; $\vec{u}$ 表示速度矢量; Γ_ϕ 为扩散系数; S_ϕ 为源项。

1.2.2 通用方程离散

对方程(1.3)在任意控制体积 CV 作体积分,利用高斯定理将体积分转化为面积分。最终可得有限体积法的基本方程,写成

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \phi dV + \int_S (\rho \phi \vec{u} - \Gamma_\phi \nabla \phi) \cdot \vec{n} dS = \int_V S_\phi dV \quad (1.4)$$

式中: $\vec{n}$ 为单元面外法向单位向量。

以下对式(1.4)中的时变项、对流项、扩散项和源项四部分离散分别加以介绍。

1. 时变项离散

时变项的离散形式有很多,如经典的迎风差分格式、中心差分格式、Crank-Nicolson(CN)格式、修正的 CN 格式^[63]、剖开算子法^[64,65]、Runge-Kutta 格式等。经典的迎风差分格式具有无条件稳定性,使用简单方便,储存量小,但只有一阶精度。通常的中心差分格式虽具有二阶精度,却只有在精细网格特征参数下才能稳定,否则求得的数值解会发生振荡,产生“伪物理效应”。剖开算子法把对流过程和扩散

过程分开来求解,在分裂过程中容易引起误差及计算量有所加大。考虑到非结构网格在实际应用中计算的经济性和实用性,这里仅对一阶迎风差分格式和二阶 CN 格式加以讨论。

对于固定网格,计算几何单元体不随时间变化,那么积分次序可以交换,即

$$F_P = \int_{t-\Delta}^t \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \phi dV dt \quad (1.5)$$

如果时间采用一阶迎风离散格式,那么式(1.4)中的时变项可以表示为

$$F_P^i = \int_V (\rho \phi - \rho^0 \phi^0) dV \quad (1.6)$$

式中:上标“0”表示前一时刻。

假定控制体中心 P 为该单元体的平均物理量,式(1.6)可进一步简化为

$$F_P^i = V_P (\rho_P \phi_P - \rho_P^0 \phi_P^0) \quad (1.7)$$

如果记

$$\begin{aligned} F_P &= - \int_S (\rho \phi \vec{u} - \Gamma_\phi \nabla \phi) \cdot \vec{n} dS + \int_V s_\phi dV \\ F_P^0 &= \left(- \int_S (\rho \phi \vec{u} - \Gamma_\phi \nabla \phi) \cdot \vec{n} dS + \int_V s_\phi dV \right)^0 \end{aligned} \quad (1.8)$$

那么二阶 Crank-Nicolson 格式可以表示为

$$\frac{\rho_P \phi_P - \rho_P^0 \phi_P^0}{\Delta t} V_P = \frac{F_P + F_P^0}{2} \quad (1.9)$$

2. 对流项离散

利用高斯定理,将式(1.4)中的对流项体积分转化为面积分,表示如下:

$$\int_V \nabla \cdot (\rho \vec{u} \phi) dV = \int_S \rho (\vec{u} \cdot \vec{n}) \phi dS \quad (1.10)$$

上式用单元交界面的值近似估算为

$$F_f = \rho_f (\vec{u} \cdot \vec{n})_f A_f \phi_f \quad (1.11)$$

式中:下标“ f ”表示该输运量所在的单元面位置; ϕ_f 为单元面几何中心输运量的值(假设为交界面上的平均值)。

由于 ϕ_f 估算精度的高低对不可压流的计算结果至关重要,因此前人发展了多种对流项估算方法,试图获得准确性和经济性较好(计算时间较省与所需内存较少)的计算格式,从而可以减少假扩散、改进对流数值稳定性、克服越界现象。常见的对流项计算格式有一阶迎风格式(UDS)、中心差分格式(CDS)、混合格式(HDS)、幂率格式(PDS)^[44]、指数格式(LEDS)^[45]。更高精度的计算格式有:Leonard 等提出的 QUICK 格式^[46]、Pollard 和 Siu 提出的 QUDSE/QUDSER 格式^[47]等。以上计算格式在结构化网格中的应用较为广泛。特别是在均分的结构化网格中,QUICK 格式还具有三阶对流项计算精度^[66],因此被普遍采用,各种商业计算软件也大多纳入了这一格式。但是,对于采用非结构网格的复杂计算区域

内的流体模拟计算,由于非结构网格拓扑结构的复杂性,更高精度的计算格式难于直接应用。以二阶迎风格式为例,迎风点上游插值点的精确定位不仅使得几何数据结构变得更为复杂,而且也消耗了大量的内存和 CPU。考虑到计算的准确性和经济性,Davidson^[40]提出了一种改进的 QUICK 格式,这里简称为 Q-QUICK 格式,但并未对该格式作相应的数值性能的研究,在以往的文献中,也鲜有报道。另外,本文还给出了另一种改进的 QUICK 格式,简称为 NQ-QUICK 格式。下面分别对非结构网格下的 UDS、CDS、HDS、PDS、LEDS、Q-QUICK 和 NQ-QUICK 格式加以简述:

1) UDS 格式

迎风格式是利用迎风点处的变量值来直接表征控制体积界面处的变量值。如图 1.1 所示,如果定义对流通量: $F_f = A_f \rho_f \phi_f (\vec{u} \cdot \vec{n})_f$, 那么界面处的变量值可以表达为

$$\begin{aligned} \phi_f &= \phi_P & F_f &\geq 0.0 \\ \phi_f &= \phi_A & F_f < 0.0 \end{aligned} \quad (1.12)$$

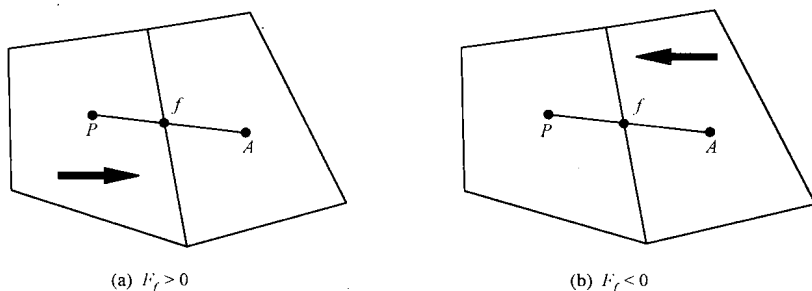


图 1.1 迎风格式(UDS)

2) CDS 格式

中心差分格式(CDS)是利用两相邻单元中心处的变量值线性内插得到界面处的变量值,它们简单的表示关系如下:

$$\phi_f = \omega \phi_P + (1 - \omega) \phi_A \quad (1.13)$$

式中: ω 为插值权因子。

3) HDS 和 PDS 格式

对于一维对流扩散问题而言,其精确解构造的指数格式计算代价非常昂贵,因此并未得到广泛的应用。取而代之的是另外两种比较实用的计算格式,即混合格式(HDS)和幂率格式(PDS)。基于精确解的指数格式的系数表达式写为

$$\frac{a_{nb}}{D_{nb}} = \frac{P_f}{\exp(P_f) - 1} \quad (1.14)$$

式中: P_f 表示派克里克数; D_f 表示扩散率; a_{nb} 表示对流扩散方程离散系数。 a_{nb}/D_{nb} 随着 P_f 变化的关系曲线如图 1.2 所示。HDS 采用三段线逼近精确解,这三段线可以看作精确曲线的外包线,保留了指数的定性性质又便于计算。其