

非直接离散偏微分方程的 CFD 方法研究

徐 昆^{*}, 黎作武^{+,1)}

^{*} (香港科技大学) ⁺ (中国空气动力研究与发展中心, 四川绵阳 621000)

摘要: 长期以来, 计算流体力学 (CFD) 的方法立足于偏微分方程 (PDE) 的数值解理论, 两者常常混为一谈。但是, 近三十年来, 偏微分方程的数值解理论进展甚微, 而计算流体力学得到了迅猛的发展, 两者有渐行渐远的趋势。我们认为, 计算流体力学脱离偏微分方程数值解理论的框架体系而独自发展是必然趋势, 是下一代计算流体力学方法的新方向。得到新生的计算流体力学将得到更广泛的应用, 可满足目前十分困难的近轨道飞行器、微尺度/多尺度流体等研究方向的数值求解需求。

关键词: CFD, PDE 离散解, PDE 模型解, Boltzmann 方程, 连续介质, 稀薄气体。

中图分类号: V211.3 **文献标识码:** A **文章编号:**

引 言

历史上, 正是由于偏微分方程数值解理论的发展, 才确定了计算流体力学可作为一门学科而存在。在 1922 年 L. F. Richardson 尝试采用数值计算方式开展天气预报工作以后^[1], 人们认识到偏微分方程除解析分析外, 还有其它求解方式, 从而吸引了大批数学家从事偏微分方程数值解的理论研究。1928 年 R. Courant, K. O. Friedrichs and H. Lewy 建立的数值求解过程的稳定性判据^[2], 是偏微分方程数值求解的第一个重要成果, 告诉人们为何过快的时间推进会致计算过程的崩溃, 以及如何正确获得数值解, 即 CFL 数稳定性准则。此后, 数学家建立了线性偏微分方程求解的相容性、稳定性、收敛性和适定性等理论, 说明了数值解可以和分析解一样, 是偏微分方程的解的形式。偏微分方程数值解打开了流体力学研究的新思路, 上世纪四十年代, Los Alamos 国家实验室的科学家们, 如 von Neumann 等, 在开展原子弹研究的过程中, 发展了流体力学的实用计算方法, 建立了计算流体力学的框架体系

^[3]。这个时期, 偏微分方程数值解和计算流体力学基本上是两个名称, 一个含义。

此后, 每一个偏微分方程数值解理论的进展, 均带动计算流体力学学科的成熟与进步, 到上世纪八十年达到了顶峰。激波捕捉格式及其相关理论 (TVD 格式等) 的发展和完善, 使计算流体力学中的激波捕捉问题得到了成功的解决^[4-6]。除了对其精度不断提升外 (如 UNO、ENO、WENO, 紧致等格式)^[7], 理论上已经难以对偏微分方程数值解有更多建树。似乎除了一些技术细节和针对特殊问题的改进外, 计算流体力学也缺乏发展方向。然而, 计算流体力学的应用却远未成熟, 在许多流动问题的分析中存在致命的缺陷, 如跨流域问题、多尺度问题等, 数值计算结果很不理想, 需要计算流体力学在此做出回应。

近年来随着近空间飞行器研究的需要, 数值模拟面临跨流域计算的问题。从地面到 100 公里以上的高空, 飞行器流场经历了从稠密气体到稀薄气体的环境变化, 使得基于偏微分方程数值解的计算流

体力学方法面临很大的困难。首先,要根据飞行器大小和飞行高度,人为将飞行器流动分为不同的流态,分别采用不同的数值计算模型来求解,如 40 公里以下,可采用连续介质的 Navier-Stokes 方程求解,在 100 公里以上高空,则需要采用稀薄气体方法求解,如基于粒子的 Monte Carlo 直接求解方法 (DSMC)^[8],在这中间的飞行高度上,采用什么方法求解则需要根据具体问题而定,且避免不了不同方法之间的搭界问题。一直以来,人们希望有一个统一的计算流体力学方法,适合全流域的流场求解,尽管已经付出相当的努力,但还没有达到理想的效果。其中一个原因是,在过渡区还没有构建出可信的宏观偏微分方程,更谈不上数值求解了。

理论上,适合全流域的偏微分方程是存在的,那就是 Boltzmann 方程^[9],但这是一个积分微分方程,与以往数值解理论中的双曲守恒型方程的解的特性不同,其数值离散求解的理论很不成熟,也就是说,直接套用目前的偏微分方程数值解理论难以得到理想的结果。该偏微分方程的数值求解理论迟迟不能取得突破,制约了计算流体力学在全流域中的应用。因此,我们必须抛开基于偏微分方程离散的数值解理论,发展全新的计算流体力学方法。

幸运的是,经过多年的思考和实践,我们已找到一个解决该方法的方法,那就是不必要对 Boltzmann 方程进行直接离散,而是借助该方程对物理过程的描述,直接在离散的空间中把真实的流动规律及其演化过程反映出来。即在离散层面上将客观实际的流动过程建立模型,从而取得该方程的演化解,再根据在离散空间中必须遵守的物理定律和利用模型方程的演化解来推进数值解,从而得到数值计算的

结果真实地体现实际流动现象。该方法我们称之为基于偏微分方程及模型演化解的计算流体力学,有别于以往直接离散 PDE 的方法,也有别于其它完全不需要 PDE 的直接求解方法,如 DSMC 等。

1 基于 PDE 直接离散的数值方法的弱点

前面我们已经论述,偏微分方程直接离散求解不能有效解决全流域流场问题,这里我们分析问题根源。

一维 Boltzmann 方程可表述为:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} = Q \quad (1)$$

这里 f 是速度分布函数, Q 是分子碰撞产生的源项,是一个积分项。

针对积分微分方程的数值求解理论目前很不成熟,进展极少。一般借鉴现有的偏微分方程数值解理论,将 (1) 改写为一个双曲线性偏微分方程和一个常微分方程^[10,11]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial f}{\partial t} &= Q \end{aligned} \quad (2)$$

然后采用相应数值离散理论进行求解。如对于 (2) 式的第一个方程,根据双曲偏微分方程数值解理论,采用迎风格式可得到 (简单起见,采用一阶精度格式): 如

$$\frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t} + u_i^n \frac{f_i^n - f_{i-1}^n}{\Delta x} = 0,$$

$$u_i^n > 0, \quad u_i^n \frac{\Delta t}{\Delta x} < 1$$

常微分方程可采用多步 Runge-Kutta 方法求解。

数值上这是一个分步算法,物理上将实际上耦合的碰撞-对流过程解耦,对流时不考虑碰撞过程,碰撞时没有对流运动。显然,这种解耦方法有很大

的缺陷，数值计算中对时间步长和空间网格的限制很大。或者说上面的数值近似只有在网格尺寸远小于分子平均自由程才成立。

在对流过程中不考虑碰撞效应限制了直接离散方法在全流域中的应用。根据物理分析，该数值计算对应的物理过程只在网格尺寸小于分子平均自由程才能严格成立。在稀薄气体领域，分子平均自由程与网格尺寸相当是可以做到的（如 DSMC 一样），而在过渡流域或连续介质区，目前的计算机资源不可能在如此密集的网格下开展计算。比如在近连续流，一个网格的大小可能是几百个分子的平均自由程，气体分子怎么可能在无碰撞的情况下从一个网格移动到另一个网格。按上面的数值离散，该格式把网格大小当成了气体的分子自由程。所以，如果仅仅根据偏微分方程数值离散理论，强行将上述过程分裂计算，自然也可以得到数值计算结果，但这种计算结果在连续介质区域和实际流动不可能符合。由此可见，即使偏微分方程反映全流域的流动规律，而直接离散该方程的数值方法仍然不能实现全流域计算，这是基于偏微分方程离散理论的计算流体力学的症结所在。其数值模型不能反映真实的物理过程。而更为严肃的问题是，在多数高超声速流的计算中，稀薄区和连续流区可以出现在同一计算的不同区域，而且它们之间的区分也不会是很清晰的。

即使不从 Boltzmann 方程出发，而替之为连续介质的偏微分方程，比如欧拉（Euler）方程。上述无碰撞自由分子流或迎风的直接数值处理对应于在网格边界流量计算方法中的通量矢量分裂法（FVS）。由于隐含的网格尺度等于分子自由程，即

使在连续介质区域，其数值粘性系数正比于网格尺度，比考虑分子碰撞的数值方法（比如以下讨论的 BGK-Type 格式）要大得多。对应于宏观欧拉方程，另一个极限是黎曼问题的解。目前黎曼问题的解是连续流数值计算方法，比如 Godunov 方法，的理论基础。通过分析气体参数的间断所产生的波系，计算流体在界面上的宏观参数，进而得到控制体内流体的宏观量的变化。解析黎曼解的理论基础是无粘性的 Euler 方程，等同于分子运动论中的平衡态假设，其内涵是分子在空间和时间的任何地方都有无穷多的碰撞。这种平衡态的假设在实际运用时，对于偏离平衡态较远的区域，比如对在数值激波结构内部的流动描述，会带来很多问题，像在高马赫数下产生激波的不稳定性^[12,13]。总之，通量矢量分裂法和黎曼问题解析解是描述宏观流体运动的两个极限的物理过程，其内涵为没有分子碰撞和有无穷多的分子碰撞。它们的物理描述是和实际的真实气体运动是有区别的。要解决全流域流场问题，我们必须构建一个真实的，精确描述一个在上述两个极限中间的一个物理过程，即对分子的运动和碰撞要同时考虑。而且它们之间的竞争程度取决于气体所在的区域。

2 基于 PDE-模型解的数值方法

如果不再从偏微分方程的离散出发，如何构建数值求解过程？答案需从流动的物理规律去找。

流动过程最基础的规律是质量、动量和能量守恒的规律，偏微分方程也是三大守恒律在质点（无穷小区域）上的体现。对于空间离散后的有限分辨率的区域，我们同样尊崇这些守恒律。

基于物理过程的数值求解是这样的：

第一步是将区域离散成许多有限大小的小空间，如 $\Omega=\Omega(\Delta x,\Delta y)$ 等，在某个时刻（初始时刻），每个空间内含有不同的流体团，微观上该流体团的分子可以用速度分布函数来描述。定义初始时刻的位于 (x_i,y_j) 的某团流体在某粒子速度段 (u_k, v_l) 的通过网格尺度平均的分布函数为：

$$(3) \quad f(x_i, y_j, t^n, u_k, v_l) = f_{i,j,k,l}^n = \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta u \Delta v} \int_{\Delta x \Delta y} \int_{\Delta u \Delta v} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, y, t^n, u, v, w) dx dy du dv dw$$

宏观上密度、速度、压力等物理量可以根据分子速度分布函数得到。下一个问题是，经过一段时间以后，这些网格平均的分布函数将如何变化？根据守恒律，在一个网格中粒子速度分布函数的变化取决于分子之间的碰撞与分子穿过网格界面的数量。针对分子速度分布函数，根据粒子数守恒（或质量守恒）下一个时刻的分布函数应为，

$$(4) \quad f_{i,j}^{n+1} = f_{i,j}^n + \frac{1}{\Omega_{i,j}} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \sum_{m=1}^{m=n} u_m \hat{f}_m(t) \Delta S_m dt + \frac{1}{\Omega_{i,j}} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega_{i,j}} Q(f) d\Omega dt$$

方程（4）式体现的物理规律是，该流体在某速度段上分子数的变化，来源于界面上流入的该速度的分子数，以及通过碰撞后得到或消失的该速度的分子数。方程（4）是真正的在离散空间中的控制方程，而且是严格的。

虽然上述物理过程很清晰，但如何衡量计算流入的分子数和碰撞作用，是我们构造数值计算过程的关键，只有正确反映了流动演化过程的数值方法才能得到符合客观实际的数值解。比如说如何刻画分子通过界面的流动。上节讨论的通量矢量分裂法（FVS）和黎曼解析解是两个在物理上不能实现的

数学极限，真正分子通过界面的运动可以是基于分子运动论的方程或跟踪大量的分子运动的直接分子动力学方法。而后者对于只求解流体宏观量的 CFD 方法来说过于昂贵。

对于单原子分子，分子运动论模型可以是 Boltzmann 方程。可是 Boltzmann 方程描述的碰撞项太复杂，难以得到其方程的演化解。目前基于演化解的 CFD 方法主要为 Xu 等人发展的基于 BGK 和其它分子动力学模型的数值求解方法。

简化了分子碰撞项的 Boltzmann 方程可以用 BGK 方程来表达^[14]：

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{g - f}{\tau}$$

这里 g 是平衡态下的分布函数，如 Maxwell 分布等， τ 是碰撞时间，和分子碰撞频率相关。

BGK 方程同样反映全流域流动的物理规律，在连续介质区域可得到 Euler 或 Navier-Stokes 方程，在近连续流和稀薄气体领域也适用。该方程比 Boltzmann 方程容易求解。

如果碰撞项为 BGK 形式，平衡态分布函数为 Maxwell 分布，即：

$$g = \rho \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\lambda((u-U)^2 + (v-V)^2 + w^2)}$$

那么基于 BGK 方程在边界面上的速度分布函数 f 的解析表达式为：

$$(5) \quad f(x_{i+1/2}, t, u, v, w) = \frac{1}{\tau} \int_0^t g(x', t', u, v, w) e^{-(t-t')/\tau} dt' + e^{-t/\tau} f_0(x_{j+1/2} - ut)$$

这里 $x' = x_{j+1/2} - u(t-t')$ 是粒子运动轨迹， f_0 是初始速度分布函数，针对不同流域的流动，初始速度分布函数有不同的设定方式。上述解析解实际反映了两个尺度上的分子运动演化规律，即右边第一项

的宏观流体尺度 (hydrodynamic scale) 和第二项的微观动理学尺度 (kinetic scale)。

讨论:

2.1 对于连续流的计算方法^[15]

在连续介质流体的假设下, 流体参数主要为宏观参数, 如密度、速度和压力等, 微观的速度分布函数可以不是求解对象。对于网格中的流体而言, 粒子间的碰撞不改变质量、动量和能量。所以只需要知道边界面上流入的质量、动量和能量就可以知道网格内的宏观量的演化。由于宏观介质内的粒子碰撞次数很多, 其分布函数偏离平衡态不远, 可以通过 Chapman-Enskog 展开直接得到 Navier-Stokes 对应的速度分布函数来描述解析解(5)中的初始态:

$$(6) \quad f_0 = \begin{cases} g^L [1 + a^L x - \tau(a^L u + A^L)], & x \leq 0 \\ g^R [1 + a^R x - \tau(a^R u + A^R)], & x > 0 \end{cases}$$

参数 (a^L, A^L, a^R, A^R) 为平衡态的展开式:

$$a^L = (\partial g^L / \partial x) / g^L, \quad a^R = (\partial g^R / \partial x) / g^R$$

上式考虑到了速度分布对平衡态的偏离。

在解析解(5)式中的积分项, 其平衡态函数 g 在界面附近和时间上的分布可以构建为:

$$(7) \quad g = g_0 [1 + (1 - H[x])\bar{a}^L x + H[x]\bar{a}^R x + \bar{A}t]$$

H 为 Heaviside 函数: $H[x] = \begin{cases} 0, & x \leq 0 \\ 1, & x > 0 \end{cases}$

于是公式(5)的解析公式可推导得到:

$$(8) \quad f(x_{j+1/2}, t, u, v, w) = (1 - e^{-t/\tau})g_0 + \left(\tau(-1 + e^{-t/\tau}) + te^{-t/\tau} \right) (\bar{a}^L H[u] + \bar{a}^R (1 - H[u])) g_0 + \tau(t/\tau - 1 + e^{-t/\tau}) \bar{A} g_0 + e^{-t/\tau} \left(\begin{aligned} & (1 - u(t + \tau)a^L) H[u] g^L \\ & + (1 - u(t + \tau)a^R) (1 - H[u]) g^R \end{aligned} \right) + e^{-t/\tau} \left(-\tau A^L H[u] g^L - \tau A^R (1 - H[u]) g^R \right)$$

相应界面上的宏观通量为:

$$F_{j+1/2, \alpha} = \int u \psi_{\alpha} f(x_{j+1/2}, t, u, v, w) du dv dw$$

。由此通量可以直接演化网格内部的宏观守恒量。也就是对方程(4)取粒子速度守恒矩的宏观量演化方程。

连续介质求解的公式推导参见 K. Xu 等过去十多年来发表的多篇文献。即使对于连续介质, 由于考虑了气体在对流运动过程中的碰撞效应, 适当地反映了物理过程中的局部非平衡性 (Navier-Stokes 方程的特点), 由此构建的数值方法比不考虑碰撞效应的其它数值格式 (如 FVS 等) 更适合于粘性流动的计算, 在以往的文章中我们已对此充分讨论。

2.2 模拟全流域气体流动的数值方法^[16]

同时针对连续和稀薄气体流动, 流体除了要演化上述宏观变量外, 求解变量也要包括速度分布函数。由于纪录了分布函数, 在方程式(5)中它的初始值不再需要 Maxwell 分布的展开, 可以直接构造, 因而界面上分布函数的初始值为

$$f_0(x, t^n, u_k, v_l, w) = f_{0,k,l}(x, 0) = \begin{cases} f_{j+1/2,k,l}^L + \sigma_{j,k,l} x, & x \leq 0 \\ f_{j+1/2,k,l}^R + \sigma_{j+1,k,l} x, & x > 0 \end{cases}$$

方程式(5)中的积分项还用 3.1 中的模型。在界面上速度分布函数的解析解为:

$$(9) \quad f(x_{j+1/2}, t, u, v, w) = (1 - e^{-t/\tau})g_0 + \left(\tau(-1 + e^{-t/\tau}) + te^{-t/\tau} \right) (\bar{a}^L H[u_k] + \bar{a}^R (1 - H[u_k])) u_k g_0 + \tau(t/\tau - 1 + e^{-t/\tau}) \bar{A} g_0 + e^{-t/\tau} \left(\begin{aligned} & (f_{j+1/2,k,l}^L - u_k t \sigma_{j,k,l}) H[u_k] + \\ & (f_{j+1/2,k,l}^R - u_k t \sigma_{j+1,k,l}) (1 - H[u_k]) \end{aligned} \right) = \tilde{g}_{j+1/2,k,l} + \tilde{f}_{j+1/2,k,l}$$

这里 $\tilde{g}_{j+1/2,k,l}$ 代表了所有与平衡态 g 有关的量,

$\tilde{f}_{j+1/2,k,l}$ 代表了所有与初始值 f_0 有关的量。上式的物理含义是, 界面上的分布函数描述了初始值随时

间向平衡态演化的过程,这是与客观实际相符合的。根据上述解析解,可以取得通过界面的宏观守恒量的通量,从而首先求得下一时刻在网格内部的宏观守恒量。这样在网格中下一时刻的平衡态分布函数也就知道了。同时可以用它来模拟网格中的碰撞项。

利用界面上的分布函数(9)可以求得对应某一粒子速度的粒子流量,用于更新网格内的粒子分布函数。在考虑到碰撞项后,守恒律(4)给出了在一个网格中分布函数在下一时刻将变化为:

$$(10) \quad f_{i,j,k,l}^{n+1} = \left(1 + \frac{\Delta t}{2\tau^{n+1}}\right)^{-1} \left[f_{i,j,k,l}^n + \frac{1}{\Omega_{i,j}} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \sum_m \Delta S_m u_m \hat{f}_{m,k,l} dt + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{g_{i,j,k,l}^{(n+1)}}{\tau_{i,j}^{n+1}} + \frac{g_{i,j,k,l}^{(n)} - f_{i,j,k,l}^n}{\tau_{i,j}^n} \right) \right]$$

相应地可针对粒子速度求矩得到流动的密度、速度等宏观参数。请注意,这里的时间步长 Δt 和网格大小只与流场参数的变化率有关,而与分子平均自由程无关。

之所以(10)可以适用于全流域求解,是因为基于解析解(9)式的分子演化没有采用非物理的假定,流体在对流的同时,也在进行碰撞以趋于局部平衡。在连续介质区域,碰撞频率快,故 τ 值很小,(9)式中与平衡态有关的项 $\tilde{g}_{j+1/2,k,l}$ 起主要的作用,这与客观实际情况是一致的。在稀薄气体区域,碰撞频率慢,故 τ 值大,(9)式中的非平衡项 $\tilde{f}_{j+1/2,k,l}$ 的作用越来越大直至占主导地位,反映了气体运动的非平衡效应。

在上述整个计算过程中,除了对空间区域的离散,没有对 BGK 方程的物理过程进行任何离散,不存在所谓针对该偏微分方程的数值解问题。整个

离散过程以流动演化的物理规律作为离散后在网格中气体分布函数的演化规律,真实反映离散后流体的演化过程。该物理规律是以 BGK 方程的形式体现的,以解析解的方式表达,因此完全不同于传统意义上的偏微分方程数值解。

此外,与其它直接求解方法(如 DSMC 方法)相比,本文采用的数值求解方法具有更大的优越性。DSMC 完全抛弃偏微分方程,以唯象的方式将分子对流和碰撞过程表达出来,理论上是不足的(即数学上的证明只对无穷多的粒子时成立,在计算上是做不到的),而且避免了粒子随机运动的干扰,也同样避免了网格尺寸必须小于分子平均自由程的限制,所以 DSMC 方法不可能成为全流域有效的求解方法。

实践已经证明,我们提出的数值计算方法在整个流域内均能取得成功。连续介质求解的可行性已经得到了公认,现在我们仅讨论在稀薄气体范围和过渡流动范围内的验证情况^[17]。

图 1 是平面 Couette 流动,有其它稀薄气体求解方法如 Monte Carlo 直接求解和 Sone 的 Boltzmann 方程解作为参照。从对比情况来看,本文方法(UBGK)和稀薄气体求解法结果一致。图 2 是 Rayleigh 问题的求解结果,从稀薄气体直到近连续流,UBGK 计算结果与 DSMC 及解析解(即自由分子流时无碰撞的 Boltzmann 方程的解)十分一致,且本文结果没有 DSMC 计算时存在统计误差的问题。

图 3 给出了高超声速圆柱绕流的计算结果。对于过渡流域($Kn=0.1$)和稀薄气体流域($Kn=1$),计算结果与 DSMC 符合很好。而随着 Kn 数的变小,

DSMC 方法计算量急剧增大，而本文方法则可自动过渡到连续介质方法，计算量反而可以减小，可体现其作为全流域计算方法的发展趋势。

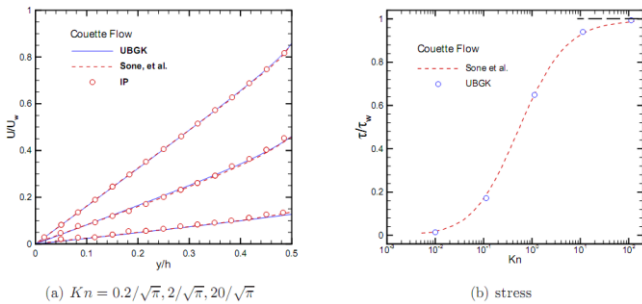


图 1 平面 Couette 流动的速度及剪切力分布

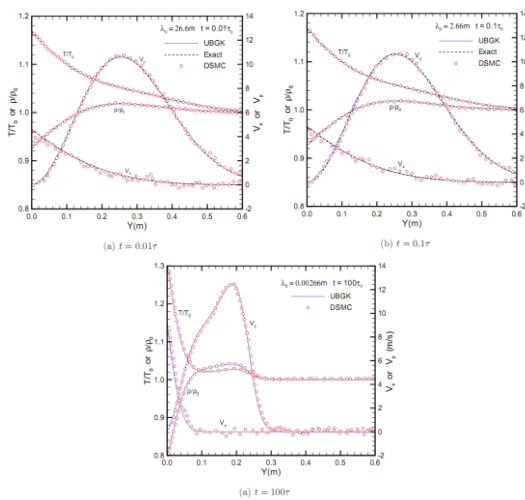


图 2 Rayleigh 问题的温度，密度及速度分布

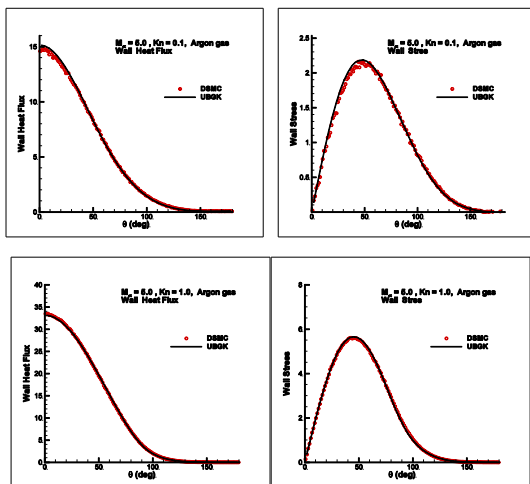


图 3 马赫 5 稀薄气体绕流在圆柱外表面的热流及剪切力分布比较

3 计算流体力学的发展方向

上世纪七八十年代捕捉激波的高精度高分辨率

格式取得突破以后，推动了计算流体力学的高速发展。到目前为止，TVD 类格式仍然是高速飞行器流体求解软件的核心。但自此以后，基于偏微分方程离散的数值解理论一直没有大的进展。计算流体力学的理论是否已经成熟？下一代数值计算方法是什么？在这些争论中，我们提出自己的看法：

(1) 计算流体力学方法远未成熟

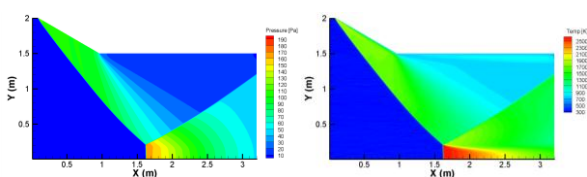
目前，所谓的计算流体力学的理论基础是指偏微分方程数值解理论，分析偏微分方程离散后求解时的存在性、唯一性、收敛性、稳定性等，以及与原偏微分方程的逼近程度，这些分析主要基于偏微分线性方程理论。针对非线性偏微分方程，这些理论远不完备，主要根据数值计算经验来确定。非线性偏微分方程的数值离散理论进展缓慢，更多地依靠其是否反映客观实际来判断，因此以此为基础的计算流体力学方法远未成熟，有效解决工程实际问题的能力还很不足。

(2) 新一代的计算流体力学方法将独立于偏微分方程数值解之外

计算流体力学的本质还是在于客观真实地反映客观实际中的流体运动问题，不是一个数学理论问题，尽管数值理论可以帮助计算流体力学做出正确的离散计算方式。如何真实准确地逼近物理过程是计算流体力学数值方法的真谛。偏微分方程数值解理论可以成为计算流体力学的一个工具，但不能等同于计算流体力学，或者将计算流体力学作为其数值理论的应用科学。事实上，计算流体力学更应该从物理过程出发，选择适合其逼近实际流动过程的道路，如本文采用的基于 PDE 解析解的方法，可以得到更好的出路。

(3) 应大力提升计算流体力学的学科地位

计算流体力学不是计算数学，是流体力学研究的主要分支。长期以来，数学家或者认为计算流体力学不是科学，或者仅是应用数学的一个分支，这是不对的。计算流体力学的内涵十分丰富，更多属于物理或力学范畴。数学中的偏微分方程不是必要的，直接模拟的 Monte Carlo 方法 (DSMC) 无需任何偏微分数学方程，紧紧是分子碰撞过程的唯象模拟，在稀薄气体条件下就可以得到与实际一致的流动结果。如果计算机能力足够，DSMC 甚至可以应用到连续区域 (参见图 4，利用 GPU 计算了一个连续流区域的激波干扰问题^[18])。显见计算流体力学不是纯粹的数学问题。



(a) 压力等值云图

(b) 温度等值云图

图 4 DSMC 计算的超声速绕楔流动问题 ($Kn=0.001$, 用了 2.55 亿个碰撞粒子)

4 小结

(1) 基于偏微分方程数值解的计算流体力学有很大的局限性，数值离散要反映真实的物理过程，才能符合计算流体力学的需要。

(2) 基于 Boltzmann 偏微分方程模型解析解的数值方法可以用于全流域求解，即可在连续介质区域内，也可在稀薄气体环境中获得符合物理实际的数值解，这是偏微分方程离散解理论不能实现的。

(3) 计算流体力学应该脱离偏微分方程离散解理论独立发展，通过构建符合物理规律的数值方法，是下一代计算流体力学的发展方向。

参考文献

- 1 L.F. Richardson (1922). *Weather Prediction by Numerical Process*. London: Cambridge University Press. Reprinted, Dover, New York, 1965.
- 2 R. Courant, K.O. Friedrichs, and H. Lewy (1928). *Über die partiellen Differenzgleichungen der Mathematischen Physik*. *Mathematische Annalen* 100, 32-74.
- 3 J. von Neumann and R.D. Richtmyer, A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks, *J. Appl. Phys.*, 21 (1950), pp. 232-237.
- 4 C. Hirsch, *Numerical computation of internal and external flows*, Wiley (1988).
- 5 E.F. Toro, *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics*, Springer, Berlin, Heidelberg (1997).
- 6 张涵信, 沈孟育, *计算流体力学—差分方法的原理和应用*, 国防工业出版社 (2003)。
- 7 付德熏, 马延文, 李新亮, 王强, *可压缩湍流直接数值模拟*, 科学出版社 (2010)。
- 8 G.A. Bird, *Molecular gas dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*, Oxford Science Publications (1994).
- 9 C. Cercignani, *The Boltzmann equation and its applications*, Springer-Verlag (1988).
- 10 V.V. Aristov, *Direct method for solving the Boltzmann equation and study of nonequilibrium flows*, Kluwer Academic Publishers (2001).
- 11 Z.H. Li and H.X. Zhang, Gas-kinetic numerical studies of three-dimensional complex flows on spacecraft re-entry, *J. Comput. Phys.* 228 (2009) 1116-1138.
- 12 K. Xu and Z.W. Li, Dissipative Mechanism in Godunov-type Schemes, *Int. J. Numer. Methods in Fluids*, Vol. 37, pp. 1-22 (2001).
- 13 Jiequan Li, Qibing Li, Kun Xu, "Comparison of the Generalized Riemann Solver and the Gas-Kinetic Scheme for Inviscid Compressible Flow Simulations", *Journal of Computational Physics*, vol. 230 (2011), pp. 5080-5099.
- 14 P. L. Bhatnagar, E. P. Gross, and M. Krook, A model for collision processes in gases I: Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems, *Phys. Rev.*, 94 (1954), pp. 511-525.
- 15 K. Xu, A gas-kinetic BGK scheme for the Navier-Stokes equations and its connection with artificial dissipation and Godunov method, *J. Comput. Phys.* 171 (2001) 289-335.
- 16 K. Xu and J.C. Huang, A unified gas-kinetic scheme for continuum and rarefied flows *J. Comput. Phys.* 229 (2010), pp. 7747-7764.
- 17 J.C. Huang, K. Xu, and P.B. Yu, A Unified Gas-kinetic Scheme for Continuum and Rarefied Flows II: Multi-dimensional Cases, to appear in *Communications in Computational Physics* (2011).
- 18 C.-C. Su, J.-S. Wu, M. R. Smith, C.-W. Hsieh, K.-C. Tseng and F.-A. Kuo, A Multiple-GPU Accelerated Direct Simulation Monte Carlo Method, preprint (2011).

