arXiv:2302.03898v2 [physics.comp-ph] 2 Sep 2023

逆渐近处理：通过修改方程捕捉流体流动中的间断

预印本

Shahab Mirjalili[*†]湍流研究中心，斯坦福大学，美国加利福尼亚州斯坦福市，邮编 94305 ssmirjal@stanford.edu

Søren Taverniers[†]帕洛阿尔托研究中心（PARC），美国加利福尼亚州帕洛阿尔托市 Coyote Hill 路 3333 号，邮编 94304

Henry Collis湍流研究中心，斯坦福大学，美国加利福尼亚州斯坦福市，邮编 94305

Morad Behandish帕洛阿尔托研究中心（PARC），美国加利福尼亚州帕洛阿尔托市 Coyote Hill 路 3333 号，邮编 94304

Ali Mani湍流研究中心，斯坦福大学，美国加利福尼亚州斯坦福市 94305，alimani@stanford.edu

2023年9月6日

摘要

开发多物理问题的准确且稳健数值解，一个重大挑战是正确模拟场量中不断演变的间断。这些间断表现为多相流中不同相之间的界面，或（单相或多相）可压缩流中的激波和接触间断。人们已开发出大量定制离散格式，以便在基于物理的模拟中捕捉这两类间断。然而，当面对诸如设计新型高超音速飞行器等迅速涌现的挑战，需要快速响应时，这些实现的复杂性会妨碍从问题建模到计算的迅速过渡。多个相互作用的物理过程需要组合，这使问题更加复杂，因为随着控制方程的修改和/或增补，专用格式可能会意外失效。我们提出“逆渐近处理”（IAT），作为捕捉流体流动中间断的统一框架，使人们能够基于标准的现成数值方法构建可直接计算的模型。IAT通过在控制方程层面进行修改来捕捉间断，而非依赖专用离散格式，因此能够无缝处理额外的物理过程，让新手终端用户更容易快速获得各种多物理场景下的数值结果。这一策略还有助于使用“多物理”编译器，将修改后的偏微分方程自动转换为数值源代码，以供 OpenFOAM 等常用计算框架读取。我们首先在两相不可压缩流的相场建模背景下阐述 IAT，随后通过展示单相可压缩流的局部人工扩散（LAD）方法如何视为 IAT 的实例，说明其通用性

*通讯作者
†两位作者对本研究贡献相同。

我们以层流高超音速压缩拐角这一实际案例，展示 IAT 能够在短短几个月内生成可直接计算的模型；对于足够小的拐角角度，该模型对壁面指标的预测接近美国国家航空航天局先进水平的 VULCAN-CFD求解器。最后，我们提出一种新颖的 LAD 方法，通过受总变差不增（TVD）通量限制器启发的“逆向工程”偏微分方程修改，消除困扰传统 LAD 的问题依赖型参数调优。通过典型数值测试，我们证明，这种受“限制器启发”的 LAD 方法与二阶中心差分结合时，能够稳健、准确地模拟可压缩流。

关键词 相场 · 弥散界面 · 激波捕捉 · 人工扩散率

1 动机与背景

许多流体流动问题中，各种物理量会发生突变；在连续介质假设下，这些突变必须被视为随时间演化或移动的间断。第一类间断是相界面，包括分隔两种不相溶相的亚临界毛细界面。在压力并不很高的亚临界条件下，这类相界面可视为间断，因为其物理厚度约为1 纳米，远小于分子平均自由程。多相流模拟需要对相界面进行建模，这推动了众多数值离散格式的发展。这些格式大体可分为两类：(a) 随着间断随时间变化而移动或变形网格，使网格与间断相贴合的方法；(b) 在非贴合背景网格内追踪或捕捉间断的算法。在流体动力学模拟中对相界面建模时，通常更倾向于采用非贴合网格格式[1, 2]。具体而言，研究发现，在非贴合网格内追踪或捕捉界面的各类单流体模型，比使网格与界面贴合的双流体模型更为适用 [2]。这是因为，流体动力学中网格可能发生畸变，因此贴合网格方法通常需要频繁重新网格划分，导致计算精度和效率降低。在两相流中，由于拓扑变化频繁，这些问题会更加突出[1, 2]。在单流体模型中，属于流体体积法（VoF）、水平集和相场（弥散界面） [1, 3, 4], 等类别的界面捕捉 [1, 5, 6], 方法 [7, 8, 9] 比明确追踪界面的界面追踪方法 [1, 10] 更具优势。这主要是因为界面捕捉格式能够自动处理拓扑变化，例如两相流中的破碎或聚并。此外，显式界面追踪往往会导致可扩展性问题 [11, 12]。

第二类流体流动间断涉及跨声速和超-声速流中的激波和接触间断，其厚度也与分子平均自由程处于同一量级，因此在连续介质表述中同样需要视为间断。针对这类间断开发专用数值方法的过程，在很大程度上沿用了上述多相流处理策略。由于频繁重新网格划分的成本高昂，可压缩流的共形网格策略（例如 [13] ）不如采用非共形网格的方法受欢迎；后者要么通过激波拟合 [14, 15], 定位并追踪系统动力学过程中产生的激波和接触间断，要么通过复杂的高分辨率格式或人工扩散方法捕捉这些间断。高分辨率激波捕捉算法包括守恒律单调迎风中心格式（MUSCL） [16], 、本质无振荡（ENO）方法 [17], 及其改进变体，例如加权本质无振荡（WENO） [18] 和目标本质无振荡（TENO） [19]格式。局部人工扩散方法包括 Cook 和 Cabot [20] 以及 Mani 等人 [21]的研究。

用于对相界面以及激波/接触间断进行建模的间断捕捉格式，采用两种截然不同的策略之一。第一种方法中，捕捉间断的任务由数值算法（通常为空间离散格式）完成，该算法会在间断附近进行调整。这种策略的例子包括：用于捕捉两相流中相界面的流体体积法，以及通过使用通量限制器的 MUSCL 格式和通过动态模板集的 ENO/WENO/TENO 格式，用于捕捉可压缩流中的激波和接触间断。尽管这类算法已成功应用于广泛的领域，但仍有两大主要缺点：

1. 实现一种既计算高效又负载均衡的间断捕捉空间离散格式，仍然是一个活跃的研究领域。一方面，在诸如流体体积法[22, 23] 等界面捕捉方法以及诸如 ENO 和混合WENO格式 [24, 25], 等激波捕捉格式中，计算成本高度集中于存在间断的区域；然而，这使得并行负载均衡变得复杂。另一方面，诸如 WENO 和 TENO 等方法在计算域内所有网格点上的计算量相同，因此负载均衡较为直接。尽管如此，由于需要计算光滑度

指标并进行所需的特征分解，这些计算的成本可能远高于中心差分等非耗散数值格式。

2. 向问题中添加新的物理过程组件时，这些高度专门化的格式可能会以意想不到的方式失效；而通过“手术式”代码修改来解决此类问题，对非专业终端用户而言是一项艰巨的任务。例如，原始 ENO/WENO 格式在接触间断处会出现涂抹现象。因此，人们开发了用于锐化接触间断的技术 [17, 26, 27]。类似地，对于可压缩多相流，通常会采用界面锐化技术，以克服 MUSCL 和 WENO 等迎风偏置格式造成的相界面涂抹 [28, 29]。

相比之下，第二类间断捕捉格式是基于偏微分方程的方法，它们在控制偏微分方程层面处理间断。在这类策略中，捕捉间断是通过设计人工项来实现的，这些人工项对原始偏微分方程进行扩充，而非通过空间离散化来实现。因此，可以在整个计算域中使用标准的 [3] 数值方法。这种方法进而使得使用“多物理场编译器”等自动化工具成为可能，从而将修改后的偏微分方程转换为可直接计算的数值源代码，即可由 OpenFOAM 等流行计算框架读取的代码。这类基于偏微分方程的策略包括用于捕捉相界面的相场模型 [9, 32, 33], ，以及用于捕捉激波和接触间断的局部人工扩散率（LAD）格式 [20, 34]。

近期研究表明，将上述两种间断捕捉策略结合起来可能会带来益处。具体而言，在可压缩两相流的研究中，[35] 指出，在偏微分方程层面添加正则化项（这是 IAT 行动的实例），可以提高采用 WENO 和 TENO 空间离散进行预测的鲁棒性和精度。对此类混合方法的讨论超出了本文的范围。

1.1 概述

我们提出“逆渐近处理”（IAT），将其作为一种统一的方法，用于系统地推导偏微分方程修改，使标准空间格式能够在整个计算域（包括存在间断的区域）内有效且一致地使用。第 2 节阐述 IAT 的概念及其提出动机，并列出将某种偏微分方程修改策略视为 IAT 方法所需满足的一系列条件。第 3 节以两相流为例阐释这些概念，并着重说明 IAT 的优势，包括其系统地确保一致性的能力。本文其余部分将介绍如何应用 IAT 捕捉可压缩流中的间断。第 4 节首先说明传统 LAD 方法可视为 IAT 的实例。随后，为避免传统 LAD 方法中依赖具体问题的调参，我们提出一种基于 IAT 的新方法；该方法借鉴了具有总变差不增（TVD）性质的基于通量限制器的数值格式， [36] 以“逆向工程”的方式构造一种所谓的“受限制器启发”的 LAD 方法。通过一系列针对典型激波问题和真实层流高超声速压缩拐角的数值结果，我们展示了传统 LAD 格式面临的挑战，以及受限制器启发的方法如何解决其中一些问题。第 5 节采用一组关键指标，评估 IAT 生成可直接计算的模型的能力。第 6 节则提出一些适用于 IAT 之外的偏微分方程修改策略的一般性指导原则。最后，第 7 节总结全文并展望后续拓展。

2 逆渐近处理

2.1 研究动机

IAT 的灵感源自匹配渐近展开法（MAE），概念上也可视为对该方法的逆向运用；匹配渐近展开法在流体动力学中得到了广泛应用。MAE 通常用于求解奇异摄动偏微分方程，方法是求出多个近似解，每个解在计算域的不同区域内有效。子问题（即内解和外解）的控制方程是更具普适性的方程（例如纳维–斯托克斯方程）的渐近极限。在区域间边界处，解会在 MAE 过程中进行渐近匹配。

IAT 的核心思想是以一种类似于逆转 MAE 过程的方式处理尖锐间断（例如相界面和激波），也就是说，已知物理间断后，我们修改原始的控制偏微分方程组，使其

[3]我们所说的“标准”方法，是指 COMSOL [30] 或 OpenFOAM [31]等现成的商业和开源计算框架中通常提供给用户的方法。本文具体指的是中心差分。

能够在整个计算域内（包括间断附近）采用标准数值方法进行离散，而不会产生显著的扩散或色散误差。下文将直观介绍 MAE 和 IAT 的理论基础。

流体动力学（以及物理学的其他分支）中的许多问题都涉及多个尺度。经过适当的尺度变换和无量纲化后，这些问题的控制方程可以视为关于小参数的约化方程的摄动 [4] 。有些问题属于正则 摄动问题，即含有小参数的问题的解相对于不含小参数的问题的解仅发生轻微摄动。例如，考虑一种稳态爬行流，其中雷诺数 $Re \ll 1$ 是小参数。在这种情况下，纳维–斯托克斯方程中的空间惯性项带有因子 Re ，因此可以安全地忽略。相比之下，对于奇异 摄动问题，当小参数趋于零时，一般问题（即包含小参数的问题）的解不会收敛到极限问题（即不含小参数的问题）的解。小参数乘在空间（或时间）最高阶导数上时，往往会产生奇异摄动问题。这类问题的解通常涉及较小的长度（或时间）尺度，例如形成薄层（或短暂过程）。例如，考虑高雷诺数Re 流动，无量纲化后， $1/Re$ 是乘在包含空间最高阶导数的黏性项上的小参数。在这种情况下，忽略黏性项会导致无效解，无法满足无滑移边界条件。

奇异摄动问题可使用 MAE [37, 38, 39] 进行解析或半解析求解。作为一个具体示例，考虑图1上方示意图所示的中等偏高 Re（即尚未过渡到湍流状态）下翼型周围的流动。该问题的解可分解为内解和外解：内解适用于翼型表面附近的薄“边界层”，外解则适用于边界层之外。翼型表面附近的流动主要受黏性影响，可通过边界层方程并施加无滑移边界条件来求解；而该区域之外的流动则可视为势流，忽略无滑移边界条件以及黏性效应所局限于的薄边界层。由此，翼型表面附近的速度场会出现不连续（外解采用滑移条件，而内解采用无滑移条件）。内外解通过匹配边界层中的渐近速度来耦合；从外部区域观察时，该边界层被假设为无限薄。 [5]

IAT 可视为*MAE* 的逆过程，也就是说，我们从物理上突变的过渡（例如相界面或激波）出发，通过修改控制方程将其人为加厚；这与从物理上具有有限厚度的过渡区（边界层内区）出发，并在外区视角下将其人为缩减为无限薄区域的做法相反。IAT 方法会人为生成加厚的过渡区，使其能够在计算网格上通过可并行的计算，采用标准数值离散格式加以解析。具有内在解不连续性的原始偏微分方程，会被一个修改后的偏微分方程取代；该方程的解在空间上呈现过渡内区和外区，并且这些区域均可通过数值模拟，在整个计算域内使用标准数值格式自动解析。此方法中的内区不一定需要由基于物理学的方程支配，但总会涉及一个控制其厚度的小参数 $\epsilon \ll 1$ （以特征长度无量纲化）。通常， ϵ 受网格尺寸控制，使得不连续性能够在几个网格单元范围内得到解析。

2.2 IAT 的要求

要被视为IAT 策略，偏微分方程修正方法需要满足以下条件：

1. 对控制偏微分方程的修改不得违背守恒定律或热力学定律等基本原则。2. 内解必须适用于一个薄区，其厚度 δ_{in} 会随着人工小参数减小而减小，即 $\delta_{\text{in}} \propto \epsilon^{\alpha_1}$ 在 $\alpha_1 > 0$的情况下。3. 内解的平衡时间尺度 τ_{in} 必须小于问题中所有其他相关时间尺度，并且应随着小参数减小而缩短，即 $\tau_{\text{in}} \propto \epsilon^{\alpha_2}$ 在 $\alpha_2 > 0$ 的情况下。换言之，内区必须由受外解控制的准稳态解支配。

[4]例如，纳维–斯托克斯方程可以视为对斯托克斯方程的摄动。[5]这种方法特别适用于解析处理 [37, 38]。近年来，高性能计算（HPC）使得以更直接的方式求解此类问题中的纳维–斯托克斯方程成为可能：通过在边界附近使用更密集的网格来解析边界层，而无需引入不连续性或划分由不同方程控制的多个区域。

4. 对控制偏微分方程的修改不应带来对空间分辨率和时间分辨率的额外要求。换言之，内区的厚度应能由网格分辨，内区达到平衡的时间尺度也不应对时间步长施加额外限制。5. 外解必须与内区之外的预期解一致。例如，在可压缩流中，人工扩散率项应在激波／接触间断之外消失，从而在外部区域恢复原始方程。此外，间断的传播速度以及跨越间断的跳跃条件不应受偏微分方程修改的影响。6. 完整内外区方程组的解必须在由 $\epsilon \to 0^{+}$定义的“尖锐界面极限”下收敛至原始（未修改）方程的间断解。

Suc这些条件必须由设计方程修改方案的物理学家加以验证。

3 两相流的逆渐近处理

为了说明 IAT 的工作原理，我们首先考虑涉及相界面的流动。图1底部面板展示了用于模拟不可压缩、不相溶两相流的 IAT 示意图。左侧最边的子面板显示了具有尖锐不连续面的原始问题，其控制偏微分方程为 $\partial\phi/\partial t + \nabla\cdot(\vec{u}\phi) = 0$。这里， ϕ 是相指示函数，在一个相中取值为 1，在另一个相中取值为 0。该控制方程表明，对于没有相变的不可压缩、不相溶两相流，相指示变量的物质导数为零。在由不连续面外部区域构成的外区中， ϕ 取值为 1 或 0，因此该方程显然成立（$0+0=0$）。然而，该方程在不连续面（界面）处定义不明确，必须在弱意义下进行解释；此时需要寻找满足熵条件 [5] 的黏性解。我们可以改为在相方程中加入两个新项，即扩散项和锐化项，它们的平衡会形成一个薄的内区，如图1中间的子面板所示。由此可得到一个修改后的偏微分方程，其解由内区部分和外区部分组成（右侧最边子面板中的复合解）。

3.1 修改后的偏微分方程及 IAT 要求验证

上述 IAT 中使用的复合方程是 [9, 40] 的二阶守恒相场模型：

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla\cdot(\vec{u}\phi) = \nabla\cdot\gamma\Big(\epsilon\nabla\phi - \phi(1-\phi)\vec{n}\Big), \tag{1}$$

其中 $\vec{n} := \nabla\phi/|\nabla\phi|$ 是界面法向量。所有长度和时间尺度均以外区问题的外部长度尺度和对流时间尺度进行无量纲化。请注意，添加到右侧的两个人工项经过因式分解后表示为通量散度，因此具有守恒性。在不可压缩系统中，这一性质是修改后仍能保持各相的体积（和质量）守恒所必需的，符合此前陈述的第一项要求。

IAT 在此引入了两个无量纲自由参数 ϵ 和 γ。小参数 $\epsilon \ll 1$ 乘在最高阶空间导数前，将原始偏微分方程转化为奇异摄动问题。这会产生一个薄内区，其中扩散通量 $\epsilon\nabla\phi$ 与锐化通量 $-\phi(1-\phi)\nabla\phi/|\nabla\phi|$相平衡。这种平衡使沿法向方向 [9, 32, 40], $\phi \approx 1 + \tanh s(\phi)/(2\epsilon)$的剖面近似呈双曲正切形，其中 $s(\phi)$是距界面（ $\phi = 0.5$ 等值线）的符号距离函数，而无量纲内区厚度与小参数成比例缩放，即 $\delta_{\text{in}} \sim \epsilon$。因此，该问题中的内区确实很薄，并且其厚度随小参数成比例减小，这符合前文提出的第二项要求。为满足第三项要求，扩散与锐化达到平衡所需的时间尺度必须远小于外区问题的对流时间尺度。这意味着 $\tau_{\text{in}} \sim \epsilon/\gamma \ll 1$。因此，我们需要第二个参数 γ来调节人工项的大小，并分隔内外解的时间尺度；该参数表示弥散界面平衡的速度 。它必须足够大，使得 $\tau_{\text{in}} \ll 1$，从而能够忽略内区方程（1）中的左端项（变化和平流），使人工扩散项与锐化项达到准稳态平衡；在 $\epsilon \to 0^{+}$ 极限下，其解会收敛到一个 ϵ–薄层区域内的双曲正切剖面。同时，如果 γ过大，我们就有可能使 $\tau_{\text{in}} \sim \epsilon/\gamma$过小，导致 IAT 对数值求解而言过于刚性；需要注意的是，必须通过显式时间步进格式在数值上解析内区的时间和长度尺度。这正是设计偏微分方程修正的计算物理学家必须为人工项的自由参数提供指导原则的一个例子。文献 [9], 证明，若 $\epsilon \sim \Delta x$，其中 Δx 表示空间网格尺寸，则选取 $\gamma \sim |\vec{u}|$ 足以确保方程（1）的解稳健且准确，同时不会引入额外的数值刚性，这与上文所述 IAT 的第四项要求一致。

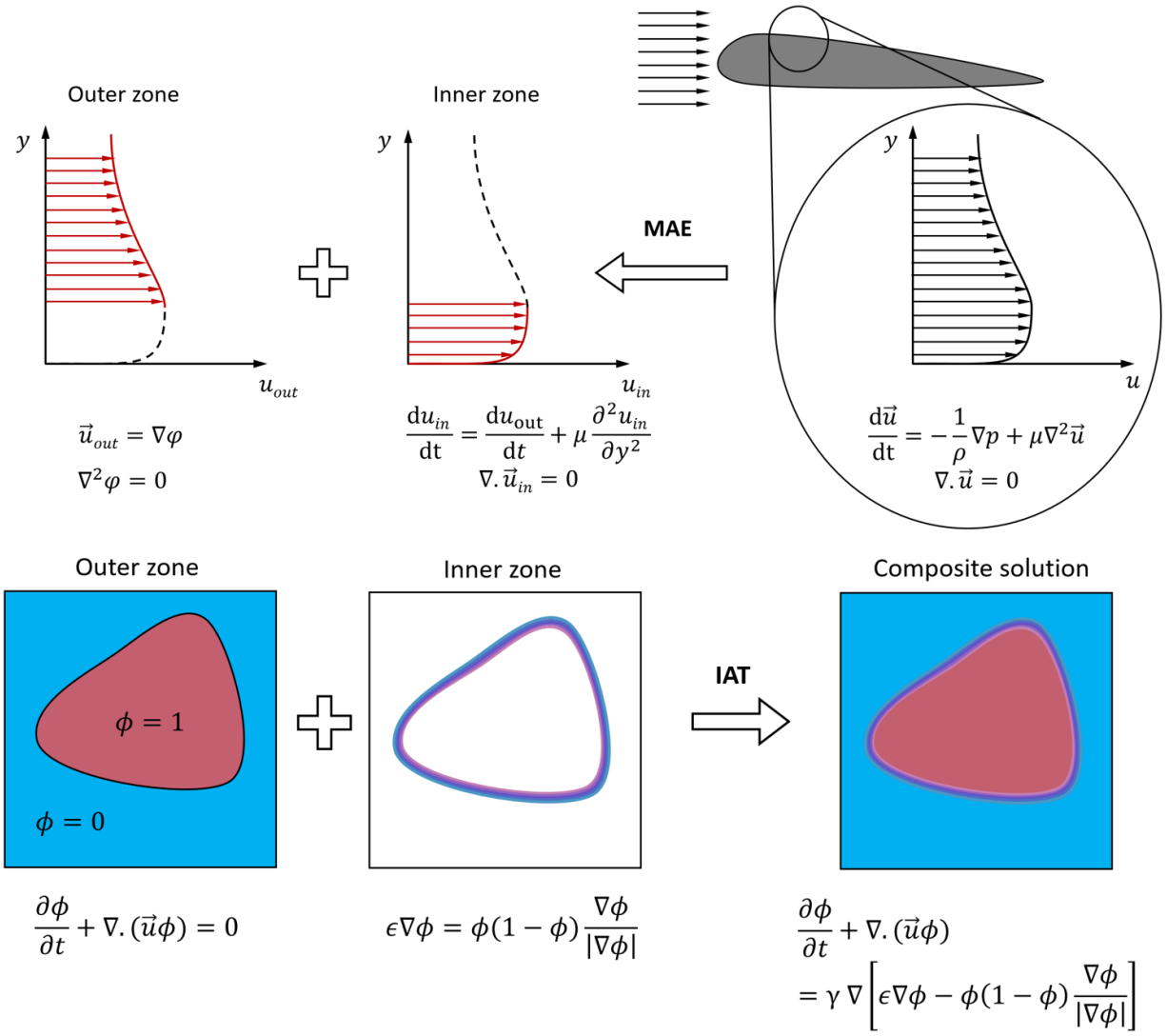


图1：上：匹配渐近法的示意图，该方法应用于求解翼型周围中高Re（即仍为层流）的流动。下：采用二阶守恒相场法对两相流进行建模的逆渐近处理示意图。

远离界面时，外区中方程（1）的解为 $\phi = 0$ 或 $\phi = 1$，因此扩散为零（$\nabla\phi = 0$），锐化也为零（$\phi(1-\phi) = 0$）。这与修正前原始偏微分方程的间断解一致，如图 1 左下子图所示。此外，正如 [9]，所述，添加人工项不会影响界面速度；在尖锐界面极限下，修正后的偏微分方程的解会收敛到原始偏微分方程的间断解。因此，方程（1）满足前文所述的第五项和第六项要求。

需要注意的是，如果省略右侧两项中的任意一项，我们的偏微分方程修改就不再属于 IAT。具体而言，如果没有扩散通量，该偏微分方程就不会成为由小参数控制的奇异摄动问题。相反，界面将保持间断状态，锐化项在任何位置都恒等于零，就好像根本没有加入该项一样。另一方面，在保留扩散项的同时省略锐化项，会得到一个奇异摄动问题。然而，由于原始偏微分方程中不存在物理上的锐化机制（这与可压缩流中的激波生成不同），界面厚度会随时间不断增大，从而使要求 2 和要求 3 失效。一段时间后，扩散还会破坏界面之外的解，因而也违反要求 5。这两个例子表明，并非所有偏微分方程修改都是有用的，也不能都被视为 IAT 的实例。

3.2 系统地保证一致性

通过修改基础偏微分方程来处理间断，相较于修改数值格式以处理间断，其主要优势之一在于，可以利用物理原理和物理洞见，以一致的方式考虑新项对耦合方程组的影响。例如，已有文献表明，必须将守恒质量通量传递到动量输运方程中，才能确保热力学一致性 [32, 41, 42, 43, 44]。这对于满足前文所述的第一项要求也是必要的。更具体地说，相场方程（质量守恒）与表示动量守恒的方程相耦合：

$$\frac{\partial(\rho\vec{u})}{\partial t} + \nabla\cdot\Big((\rho\vec{u}-\vec{S})\otimes\vec{u}\Big) = -\nabla P + \nabla\cdot\Big(\mu(\nabla\vec{u}+\nabla^{\mathrm{T}}\vec{u})\Big) + \vec{F}_B, \tag{2}$$

其中 P 为压力场， ρ 和 μ 分别为通过对相场进行线性插值得到的密度和动力黏度，计算方式如下：

$$\rho = \rho_1\phi + \rho_2(1-\phi), \tag{3}$$

其中， ρ_1 和 ρ_2 分别为纯相 1（$\phi=1$）和纯相 2（$\phi=0$）的密度，并且

$$\mu = \mu_1\phi + \mu_2(1-\phi), \tag{4}$$

其中， μ_1 和 μ_2 分别为纯相 1 和纯相 2 的动力黏度。F_B 表示体力，包括表面张力。人工项 S 为质量-动量一致性修正通量，定义如下：

$$\vec{S} := (\rho_1-\rho_2)\vec{R}, \quad \text{where } \vec{R} := \gamma\Big(\epsilon\nabla\phi - \phi(1-\phi)\vec{n}\Big), \tag{5}$$

其中， R 是方程（1）右端散度算子内的人工项。直观而言，在动量方程中包含该项的原因在于，由 R 导致的人工质量输运会进一步产生人工动量输运。正如 [43, 44], 所示，对偏微分方程进行一致性修改以满足质量守恒定律和动量守恒定律，会自动使动能守恒得以保持，尽管方程经过了修改。这一点意义重大，因为对控制方程进行简单修改可能会产生意料之外的后果，例如违反未被明确强制满足的其他守恒原理，从而导致非物理的数值效应 [45]。在处理离散方程或计算几何操作时，进行能够保持这类原理的一致性修改要困难得多，并且在数值层面也更难控制。

方程（1）至方程（5）给出的耦合方程组满足前文列出的全部 IAT 要求，并且通过以受控方式加厚界面，可以与标准数值格式（例如中心差分）结合，用于为实际两相流开发稳健的数值求解器，包括具有高密度比和/或高 Re 数 [44]的两相流。对于通过方程（1）进行的相场建模，人工项的形式受到守恒型水平集方法 [6] 的启发，并由 [40]根据 Allen–Cahn方程进行形式推导。 [9] 为自由参数 ϵ 和 γ 提供了指导原则，以确保数值稳定性和有界性。这并非开发具有此类性质的相场模型的唯一途径。用于模拟两相流的相场方程还有其他选择，例如 Cahn–Hilliard方程 [33, 43, 46]和守恒Allen–Cahn方程 [47, 48, 49, 50, 51]。这些相场模型也都可以视为 IAT 的实例。这些两相流 IAT 方案之间的主要差异，主要在于相场方程中右端项的形式以及自由参数的取值，因为方程（2）至（5）可以基于热力学原理推导得到，其中包括质量守恒、动量守恒和动能守恒。关键在于，只要相场方程中的右端项采用守恒形式并满足全部 IAT 要求，则将其与方程（2）至（5）耦合后，应能得到一个可用于模拟真实两相流的方程组。

3.3 IAT 在两相流标量输运中的应用

第二个稍微复杂一些的例子涉及两相流中被动标量（如热、电荷或化学物种）输运的建模。在物理不连续情形下，控制各相中组分浓度的方程是对流扩散方程，

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla\cdot(\vec{u}c_i) = \nabla\cdot(D_i\nabla c_i), \tag{6}$$

对于 $i=0,\ 1$，其中 D_i 和 c_i 分别是相 i中的扩散率和组分浓度。现在，考虑一种稀释物种，它不溶于另一相，因此仅存在于一个相中，例如两相水-空气系统中的盐。此时，人们可能会想用单一标量值 c 来表示整个计算域内的标量浓度，并仿照式 (3) 和式 (4)，直接计算扩散率场：

$$D = D_1\phi + D_2(1-\phi). \tag{7}$$

然而，在这种情况下，耦合系统会导致组分人为地泄漏到不溶相中[52, 53]。换言之，无法得到预期的外解，因而不满足 IAT 的第五项要求。在 [52], 中，通过类比相场方程（式 (1)），推导出了一种与相场模型相一致的受限标量输运偏微分方程。文献 [53]进一步推导出一种适用于任意两相系统的、更全面的标量输运 IAT，其中还纳入了界面传递。该研究假设两相之间的界面具有微观结构，并据此运用摄动分析、润滑理论和均匀化方法，推导出界面传递项和标量输运模型；该模型适用于任意扩散率比，包括受限标量情形。文献 [53]中推导出的标量输运模型满足上述 IAT 的所有要求。

4 逆渐近在可压缩流中的应用

IAT 方法适用于涉及尖锐间断的多种流体流动。第 3 节中，我们概述了 IAT 在两相流中的应用，而采用由此得到的方法进行的数值模拟见 [9, 22, 44, 52,53]。在本文余下部分，我们将聚焦于单相可压缩超声速／高超声速流。具体而言，我们将介绍传统 LAD，以及一种受赋予总变差不增（TVD）性质的通量限制器启发而提出的新型 LAD 方法，作为应用 IAT 对单相可压缩流进行建模的示例。每一节中，我们都会提供数值结果，以说明各方法的性质。

为在数值上捕捉激波而以人工黏性补充物理黏性的构想，最早可追溯至 [54] 的开创性工作。Cook 和 Cabot [20] 提出了一种局部人工黏性方法，可与高阶紧致差分格式结合使用，以捕捉激波-湍流相互作用。局部人工黏性需要在流场平滑且分辨率充分的区域中趋于零，并在激波附近提供阻尼，以捕捉间断。此后，采用高阶空间导数检测间断、再进行滤波的动态局部人工扩散（LAD）方法已被其他研究者广泛采用。具体而言， [55] 将 [20] 的方法扩展为包含人工质量扩散率和组分浓度扩散率，分别用于捕捉接触间断和组分间断。Cook [56]将人工热导率引入能量方程，用于可压缩湍流混合的大涡模拟；Kawai 和 Lele [57] 则将这一形式扩展到曲线网格和各向异性网格。鉴于激波附近应变率张量与膨胀率的幅值相近，而远离激波的湍流涡旋中，后者要小得多，Mani 等人 [21] 对人工体积黏度（ABV）模型进行了修改，以将 ABV 的应用限制在激波处。具体而言，他们建议基于膨胀场的拉普拉斯算子进行局部化，并采用一种在压缩区开启、在膨胀区关闭的激波“传感器”。Johnsen 等人 [58] 进行的对比研究表明，与 [56]提出的原始 LAD 方法相比，这项修改显著改善了可压缩湍流统计量的预测。此外，Kawai 等人 [34] 表明，添加基于 Ducros 型传感器的开关，除了在膨胀区之外，还能在弱可压缩区更精细地关闭基于膨胀率的 ABV。最近，Lee 和 Lele [59]研究了这些 LAD 模型在涉及爆燃和爆轰的问题中的表现。

上述所有研究均采用高阶（即六阶至十阶）紧致差分格式进行空间离散化。前述针对 LAD 方法的局部化策略进展，带来了用于模拟含激波可压缩湍流的高分辨率、低成本、易于实现且模块化的数值方法。鉴于这些方法在湍流模拟中的优势 [60]以及实现和调整方面的便捷性，本研究采用类似思路，仅使用二阶中心差分（CD）空间运算。我们通过在质量、动量和总能量方程中分别加入人工质量扩散率、人工剪切/体积黏度和人工热导率，以控制二阶格式产生的大色散误差。包含人工扩散率及热力学一致性所需项的控制方程见第 4.1 节。我们在第 4.1.2 节和第 4.1.3 节进行的数值测试表明，采用 LAD 格式配合低阶 CD 格式，其效果不如文献中通常使用的高阶紧致差分格式。具体而言，我们发现，使用 CD 进行空间离散时，必须针对具体问题调整无量纲用户定义常数，才能达到可接受的精度。此外，LAD 格式的鲁棒性并无保证。为克服这些不足，受二阶总变差不增（TVD）通量限制器分析的启发，我们在第 4.2 节提出一种局部化人工扩散率项的新方法。与以往的现象学 LAD 格式不同，该方法无需针对具体问题调整参数，也无需通过滤波对解进行去混叠，即可使用 CD 实现高精度和鲁棒性。我们在一维（1D）设置下推导该模型，并在第 4.2.2 节使用典型的一维测试评估其性能。最后，我们在第 4.2.3 节提出一种方法，利用笛卡尔网格将所提出的模型推广至多维设置。

4.1 传统局部化人工扩散率 (LAD)

为了正则化可压缩流中的激波和接触间断，可以借鉴物理扩散率，引入“人工扩散率”（AD）。通过 AD 对热完全气体的可压缩纳维–斯托克斯方程进行一致性修正，可得：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = \nabla \cdot \vec{m}^*, \tag{8}$$

$$\frac{\partial (\rho \vec{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \nabla P = \nabla \cdot (\vec{m}^* \otimes \vec{u}) + \nabla \cdot (\tau + \tau^*), \tag{9}$$

$$\frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot [(\rho E + P)\vec{u}] = \nabla \cdot \left(\vec{m}^* \frac{|\vec{u}|^2}{2} \right) + \nabla \cdot [\vec{u} \cdot (\tau + \tau^*)] - \nabla \cdot (\vec{q} + \vec{q}^*). \tag{10}$$

其中， ρ 是密度， $\vec{u}$ 是速度， $E = e +$ （$|\vec{u}|^2/2$）是单位质量总能量，其中 e 是单位质量内能； $P =$ （$\gamma - 1$）ρe 是压力， $\vec{q} = -k\nabla T$ 是热通量，其中 k 是热导率， $T =$ （$\gamma - 1$）e/R 是温度； R 是气体常数， γ 是气体的多方系数。此外， τ 是由以下本构关系给出的黏性应力张量

$$\tau = \mu[\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T] + (\beta - 2\mu/3)(\nabla \cdot \vec{u})\delta, \tag{11}$$

其中， μ 是动力剪切黏度， β 是体积黏度， δ 是单位张量。

上述方程还显式加入了 $\vec{m}^*$、 τ^*和 $\vec{q}^*$，它们分别是人工质量通量、人工黏性应力张量和人工热通量。动量方程和总能量方程还加入了进一步的修正项，即 $\nabla \cdot (\vec{m}^* \otimes \vec{u})$ 、 $\nabla \cdot \left(\vec{m}^* |\vec{u}|^2/2\right)$和 $\nabla \cdot (\vec{u} \cdot \tau^*)$ ，以确保热力学一致性[41, 42, 61]。人工黏性应力张量 τ^*和人工热通量 $\vec{q}^*$的计算方式与相应的物理量类似，只需将物理扩散率替换为对应的人工扩散率（以星号标记）。人工质量通量 $\vec{m}^*$ 没有对应的物理量，其计算方式如下：

$$\vec{m}^* = \chi^* \nabla \rho, \tag{12}$$

wh其中 χ^* 是人工质量扩散率（AMD）。对于 AMD， [55] 提出了以下公式 ：

$$\chi^* = C_\chi^l \frac{a_0}{c_P} \Delta^{2l+1} \overline{|\nabla^{2l} s|}, \tag{13}$$

其中，上划线表示截断高斯滤波器 [56]， a_0 是参考声速， c_P 是定压比热， s 是熵， Δ 是基于网格单元尺寸的特征长度， C_χ^l 是一个 $O(1)$用户定义常数，其 l 需指定。采用熵的空间导数，使 AMD 除了在激波附近激活外，也会在接触间断和材料间断附近激活。

接下来，采用以下方法对人工剪切黏度进行局部化：

$$\mu^* = C_\mu^l \overline{\rho \Delta^{2l+2} |\nabla^{2l} (\nabla \cdot \vec{u}) H(-\nabla \cdot \vec{u})|}, \tag{14}$$

其中， $\epsilon = \frac{1}{2}\left(\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^{\mathrm{T}}\right)$ 是应变率张量， C_μ^l 是一个 $O(1)$用户定义常数。请注意，在式（14）中，我们使用膨胀场的空间导数，而非 [20]中使用的应变率张量的模。这样做是为了避免数值耗散影响远离激波和间断的涡结构，尤其是在湍流状态下。对于人工体积黏度，根据 [21]，我们采用：

$$\beta^* = C_\beta^l \overline{\rho \Delta^{2l+2} |\nabla^{2l} (\nabla \cdot \vec{u}) H(-\nabla \cdot \vec{u})|}, \tag{15}$$

同时，以下通过此方式对人工热导率进行局部化：

$$k^* = C_k^l \overline{\frac{\rho a_0}{T} \Delta^{2l+1} |\nabla^{2l} e|}. \tag{16}$$

在公式 (15) 和公式 (16) 中， C_β^l 和 C_k^l 是 $O(1)$ 个用户定义常数。

4.1.1 IAT 要求的验证

现在我们证明，传统 LAD 方法满足第 2.2 节所列 IAT 方法的所有要求。以动量方程和人工剪切黏度及体黏度的情况为例（式（9）、（14）和（15））。

1. 式（9）中人工项的守恒形式自动保证动量守恒。此外，涉及 $\vec{m}^*$ 的修正项确保与质量方程（式（8））保持一致，进而在能量方程（式（10））中得到一致处理，以保证热力学一致性。2. 通过检查式（14）和（15）可知，人工黏度值随 $u\Delta$ 缩放。因此，人工小参数与网格尺寸 Δ 成正比。在内区，对流通量与人工扩散通量相平衡；通过尺度分析可知，内区厚度为 $O(\Delta)$。因此，内解存在于一个狭窄区域内，其厚度会随着人工小参数减小（即网格加密）而缩小。3. 内解达到平衡的时间尺度可通过平衡时间项与扩散项得出，即 $\tau_{\text{in}} \sim \Delta/u$。这就是信息跨越单个单元传播所需的时间尺度。因此，即使在较粗的分辨率下，预计这一时间尺度也远小于问题中的所有物理时间尺度。此外，由于人工小参数与网格尺寸成正比，随着该参数减小，这一时间尺度也会缩短。4. 内区厚度与网格尺寸同阶，内区达到平衡的时间尺度与信息跨越单个单元传播所需的时间同阶，而后者决定了仿真的 CFL 要求。因此，偏微分方程修改不会引入更严格的空间或时间分辨率要求。5. 根据设计，在远离间断的光滑区域（即内区之外），人工扩散率项会消失。因此，在远离激波和接触间断的区域，原方程得以恢复。此外，在不存在物理黏度的情况下，对激波周围的控制体应用 Rankine-Hugoniot 跳跃条件可知，添加局部人工黏度不会改变激波速度。6. 随着网格加密，控制人工黏度大小以及激波的人工小参数趋于零。因此，在不存在物理黏度的情况下，随着人工小参数减小至零，动量方程（式（9））的解收敛至间断（尖锐）的熵解 [5]。

4.1.2 一维典型问题

这里我们在两个典型激波流动问题上测试传统 LAD 格式：Sod激波管问题 [62]和一维Shu–Osher问题 [26]。请注意，本文典型问题中的所有数值均为无量纲数。

Sod 激波管用于评估格式捕捉运动激波和接触间断的能力。在单位长度的空间区域 $[0,1]$, 上，于时间 $t=0$, 一个初始静止的激波位于 $x=0.5$，将左端的区域与（无量纲）密度 $\rho_l=8$、速度 $u_l=0$和压力 $P_l=7.128$ 同右端的区域 $\rho_r=1$、$u_r=0$ 和 $P_r=0.712$ 分隔开，同时 $\gamma=1.4$。采用具有 $\Delta=0.005$ 的均匀同位网格，时间步长为 $\Delta t=0.0005$。在时间 $t_f=0.2$评估该解。

Shu-Osher问题是激波-湍流相互作用的一维理想化模型，其中马赫数3激波传播进入一个存在密度扰动的场。在空间区域 $[-5,5]$内，时刻为 $t=0$时，位于 $x=-4$的激波将左端密度为（无量纲） $\rho_l=3.857$、速度为 $u_l=2.629$、压力为 $P_l=10.333$ 的区域与右端具有 $\rho_r=1+0.2\sin(5x)$、$u_r=0$ 和 $P_r=1$ 的区域分隔开，而 $\gamma=1.4$。采用间距为 $\Delta=0.025$ 的均匀共置网格，时间步长为 $\Delta t=0.001$。在 $t_f=1.8$处评估解。评估该问题中某种格式性能的一项重要标准，是其捕捉激波后区域熵波的准确性。特别是，迎风偏置格式的数值耗散会削弱这些物理振荡。同样，我们希望LAD格式在该光滑场区域趋于零。

在针对上述问题进行数值实验时，我们对质量和热采用传统 LAD，并对动量扩散采用 $l=1$，同时使用二阶中心差分进行空间离散。与两相流中采用的有界性分析不同，[9], 要通过纸笔分析方程 (8)–(16) 所描述的耦合系统，并基于总变差不增性质或正性来指导自由参数的选择，并非易事。因此，我们使用上述两个典型一维问题来优化 LAD 方法的自由参数。对于一维问题，人工剪切黏度和体积黏度的作用相同。因此，我们在由 $C_\chi^1, C_\beta^{1/2}$ 和 C_k^1 构成的三维参数空间中进行参数扫描。为了同等重视速度、密度和压力的捕捉效果，我们分别为 Sod 激波管和 Shu-Osher问题确定最优参数组。图 2(a、b) 展示了这两个问题使用各自最优自由参数值时的模拟结果。尽管对自由参数进行了优化，我们仍观察到 Sod激波管问题的间断处存在过度振荡（图 2(a)）。

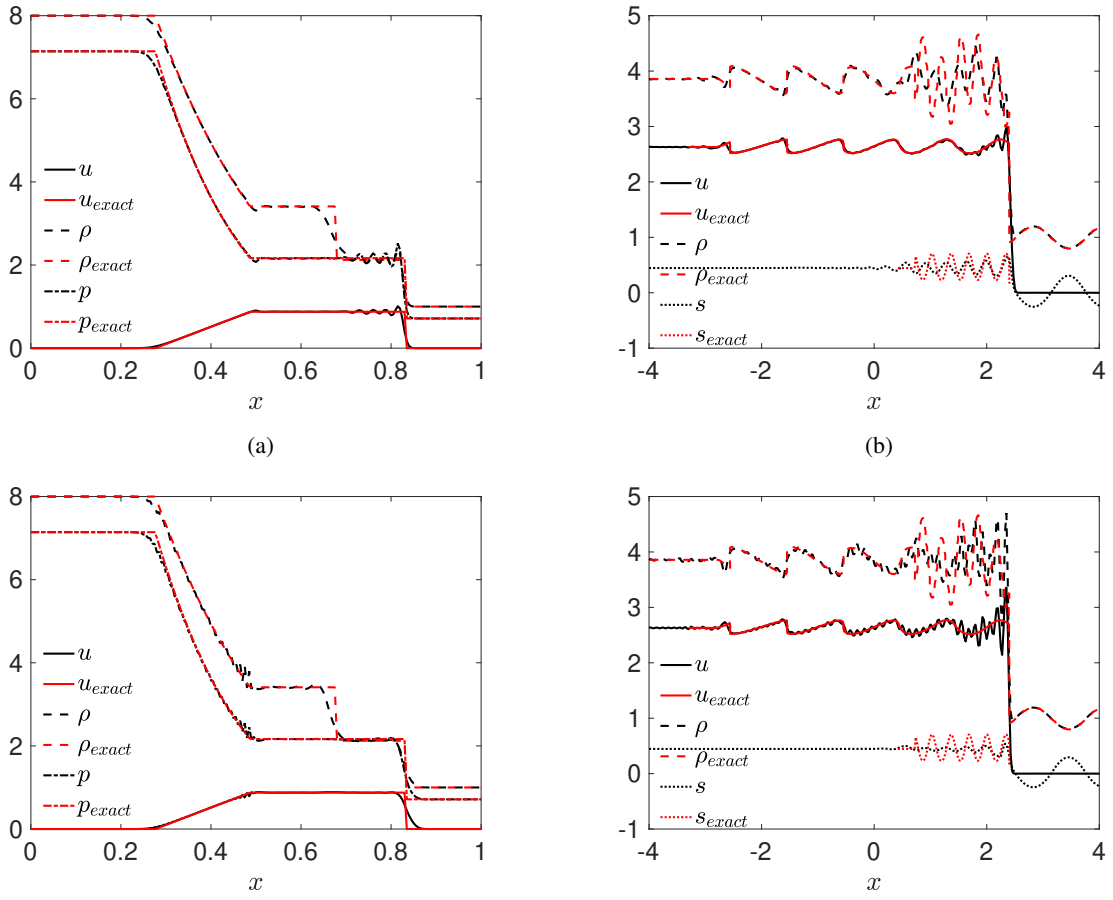


图 2：使用传统 LAD 进行仿真时的结果。采用最优 C_χ^1、$C_\beta^{1/2}$，并将 C_k^1 值绘制在上方各面板中，其中 (a) 为 Sod 激波管，(b) 为 Shu-Osher问题。将面板 (a) 和 (b) 中的参数值互换后，传统 LAD 的仿真结果绘制在下方各面板中，其中 (c) 为 Sod 激波管，(d) 为 Shu-Osher问题。请注意，互换自由参数值后，这两个问题的结果均有所恶化，表明 CD+LAD 方法具有显著的问题依赖性。

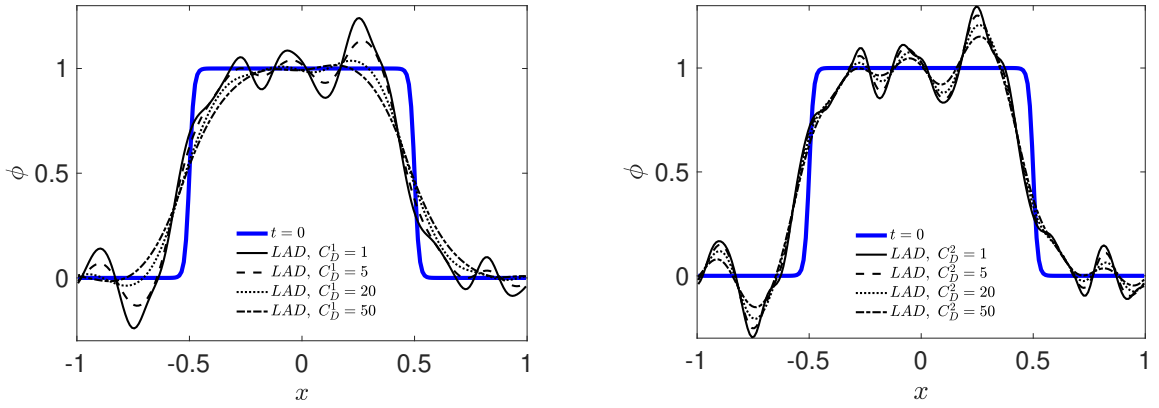
从图 2(b) 可以清楚看出，使用针对 Shu-Osher问题优化的自由参数，能够捕捉激波后的熵波以及物理速度和密度振荡，且不会造成过度阻尼。关键的是，如图 2(c-d) 所示，若交换两个问题的最优参数组，两个问题的结果都会显著变差，这表明这些参数高度依赖具体问题。这意味着，使用 LAD 格式与中心差分相结合时，每遇到一个新问题，都必须单独调整自由参数。这种做法并不理想，在实践中也几乎不可能实现，这正是我们在第 4.2 节寻求无需针对具体问题调参的 LAD 格式的主要原因。

为进一步说明将 CD 与传统 LAD格式结合的缺点，我们考虑一个简单的一维问题，其中速度固定为 $u = 1$，通过以下方式输运标量 ϕ：

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial (u\phi)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}(D^* \frac{\partial \phi}{\partial x}), \tag{17}$$

$$D^* = C_D^l |u|_{\max} \Delta^{2l+1} |\overline{\nabla^{2l} \phi}|, \tag{18}$$

其中，D^* 为人工扩散率，C_D^l 为用户定义常数。从双曲正切形初始剖面开始，液滴采用四阶龙格–库塔时间推进，在 $[-1, 1]$ 周期域中推进 20 个时间单位，并使用 $\Delta = 0.01$进行离散化。需要注意的是，尽管稳定 CD离散需要 D^*，但使用全局值会导致过度扩散。使用式（18）中所述局部模型且 $l = 1$，2时得到的模拟结果如图 3 所示，其中



(a) (b)

图 3：使用传统 LAD 方法对标量平流方程（17）进行计算所得的结果，绘制于 $t_f = 20$，对应 (a)$l = 1$和 (b) $l = 2$；结果展示了 ϕ 剖面，它们或受到过度扩散的影响，或存在色散误差。

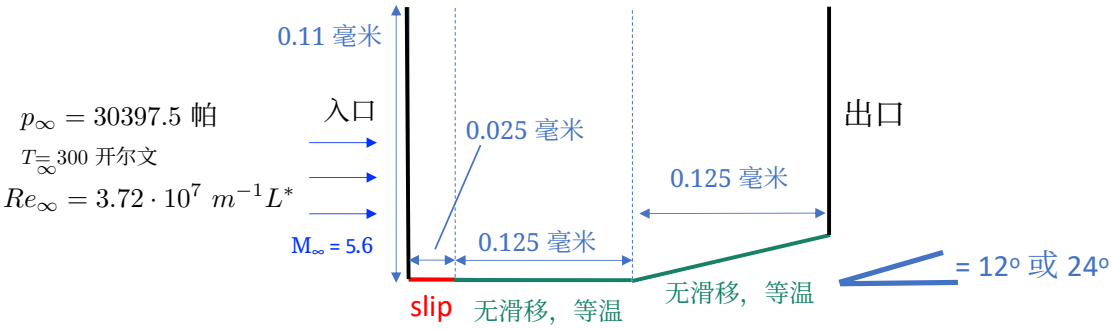


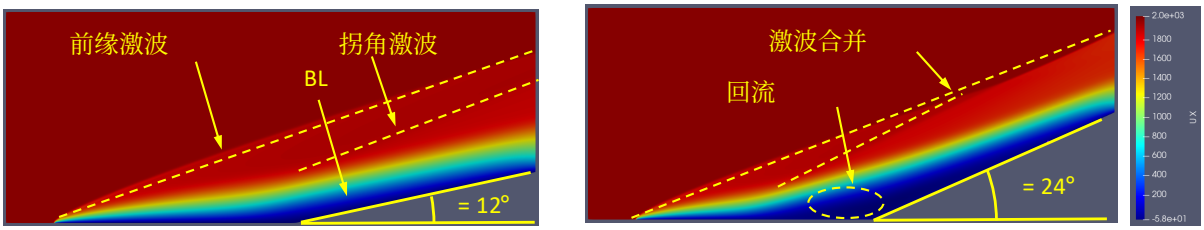
图 4：用于研究高超声速激波与边界层相互作用的层流压缩拐角示意图。

显示出明显的过度欠冲/过冲以及解的数值扩散。这与 Sod 激波管的模拟结果一致；在图 2(a、c)的间断处，我们观察到了过度振荡或过度扩散。

4.1.3 二维压缩拐角，层流高超声速流

接下来，我们考虑一个更复杂的问题：二维层流高超声速流经过压缩拐角时发生的激波与边界层相互作用（SWBLI）。准确、稳健地模拟超声速（马赫数 ≥ 1）和高超声速（马赫数 ≥ 5）流动，对于高超声速飞机的可靠运行和持续发展至关重要，也有助于确保载人航天器安全再入大气层。这类问题中一个值得关注的几何构型是压缩拐角 [63]（图 4）。从前缘 [64]开始，平板和斜坡段表面附近形成的激波（SW）与边界层（BL）在此发生相互作用。SWBLI，尤其是具有较大转弯角的高超声速压缩拐角中的 SWBLI，在准确捕捉激波/激波和激波/边界层相互作用的物理过程、层流-湍流转捩以及边界层分离方面，带来了诸多计算挑战 [65, 66, 67]。为了使该问题更适合用于测试，我们考虑一种基于文献 [68] 的层流设置。该设置采用高超声速相互作用参数 $\chi = M_\infty / Re_\infty = 1.37$ 来表征 SWBLI 的强度，自由来流马赫数为 $M_\infty = 5.6$，自由来流雷诺数为 $Re_\infty = 3.72 \times 10^7 L^* \mathrm{m}^{-1}$；其中，$L^* = 0.125 \times 10^{-3}\,\mathrm{m}$ 为平板无滑移段的长度（图 4）。

我们考察转向（偏转）角 $\alpha = 12°$，此时不会发生流动分离或激波合并；以及 $\alpha = 24°$，此时预计会发生流动分离和回流，同时还会发生激波合并。对于每种情况，我们将采用二阶中心差分的传统 LAD 所作的预测，与美国国家航空航天局 VULCAN-CFD 代码 [69] 的预测进行比较，比较三项重要的壁面指标：无量纲热流、压力和剪切应力（图 7）。



(a) (b)

图 5：采用传统 LAD 得到的稳态附近转弯角为 $\alpha = 12°$（左）和 $\alpha = 24°$（右）时的水平速度场可视化。图中标示了各种流动特征，展示了拐角角度增大时流动状态的变化。

对于当前问题，我们在式 (13)、式 (14)、式 (15) 和式 (16) 中分别取 l 为 $1/2$、0、0 和 $1/2$，并将用户定义常数 $C_\chi^{1/2}$、C_μ^0、C_β^0 和 $C_k^{1/2}$ 设为：

$$C_\chi^{1/2} := \hat{C}_\chi \frac{c_P}{a_0 \Delta} \frac{\|\vec{u}\|_{\max}}{\|\nabla s\|_{\max}}, \tag{19}$$

$$C_\mu^0 := \hat{C}_\mu \frac{\rho_{\max} |(\epsilon : \epsilon)^{\frac{1}{2}}|_{\max}}{\left[\rho |\nabla \cdot \vec{u}| H(-\nabla \cdot \vec{u})\right]_{\max}}, \tag{20}$$

$$C_\beta^0 := \frac{\hat{C}_\beta}{\Delta} \frac{\rho_{\max} \|\vec{u}\|_{\max}}{\left[\rho |\nabla \cdot \vec{u}| H(-\nabla \cdot \vec{u})\right]_{\max}}, \tag{21}$$

$$C_k^{1/2} := \frac{\hat{C}_k}{a_0 \Delta} \frac{R \rho_{\max} \|\vec{u}\|_{\max}}{(\gamma - 1)\left[(\rho/T)\|\nabla e\|\right]_{\max}}. \tag{22}$$

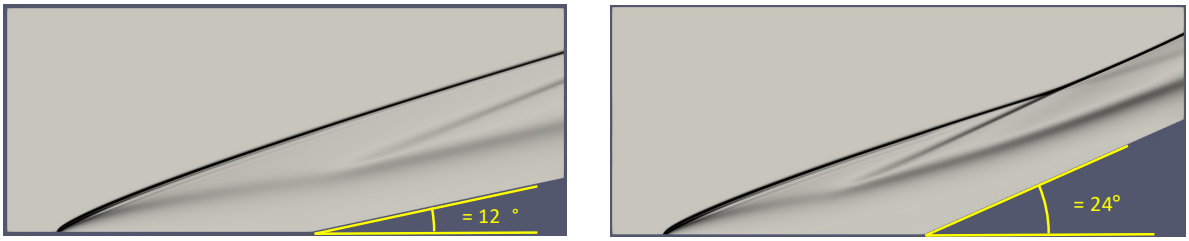
此处我们设定 $\hat{} C_\chi := 0$，$\hat{} C_\mu := 0.02$，$\hat{} C_\beta := 0.04$ 和 $\hat{} C_k := 0.02$ [6]。此外，我们考虑水平和垂直方向网格单元尺寸分别为 4×10^{-7} m 和 2×10^{-7} m 的计算网格。由于拐角几何结构的影响，壁面附近的网格略有非均匀，因此该区域的实际网格单元尺寸与指定值略有差异。

我们使用 OpenFOAM 对压缩拐角进行了所有模拟。尽管推导人工偏微分方程项花费了数月时间，但得益于采用中心差分进行空间离散，编写实现修正偏微分方程方法的数值源代码却很直接。此外，作为 CompMods 最终交付成果的一部分，我们展示了“多物理场编译器”如何自动生成此源代码，从而展现 I AT 在生成可直接计算的模型方面的能力。

图 5 和图 6 分别展示了接近稳态时，$12°$（左）和 $24°$（右）转弯角下的水平速度场和密度梯度大小。我们可以清楚地看到流动状态的差异：转弯角较小时，流动保持附着于壁面，前缘激波与拐角激波不相交；转弯角较大时，则出现流动分离和回流，前缘激波与拐角激波合并。前一种情况（图示时刻为 $t = 8 \times 10^{-7}$ s）比后一种情况（图示时刻为 $t = 1.6 \times 10^{-6}$s）更快达到稳态。

对于所研究的 $\alpha = 12°$ 和 $\alpha = 24°$两种转弯角，图 7 表明，LAD 能够捕捉三种壁面指标空间分布的整体形状和幅值。此外，如表 1 所示，对于 $\alpha = 12°$ 和 $\alpha = 24°$，采用网格单元尺寸为 4×10^{-7} m 的 LAD 模型所预测的壁面积分热通量、压力和剪切应力，相对于 VULCAN-CFD 的相对误差分别低于 12% 和 10%。然而，在较大的转弯角 $24°$下，我们注意到 LAD 预测的壁面压力存在非物理振荡；同时，从图 7(f) 的壁面剪切应力分布可以看出，其预测的分离和再附着位置与 VULCAN-CFD 对应位置存在显著偏差。图 7 表明，提高网格分辨率并未改善 LAD 预测的壁面剪切应力与 VULCAN-CFD 对应结果的一致性，反而进一步增大了壁面压力振荡的幅值。尽管进一步调节人工参数 C_χ、C_μ、C_β 和 C_k 或许能够改善 LAD 与 VULCAN-CFD 结果之间的一致性，但这

[6]这些数值基于有限的参数扫描，旨在尽可能降低最大人工耗散，同时保持仿真的稳定性。更全面的参数扫描或许能得出更优的数值，但会增加计算开销。



(a) (b)

图 6：使用传统 LAD 获得的稳态附近转弯角 $\alpha = 12°$（左）和 $\alpha = 24°$（右）的密度梯度幅值可视化。

表 1：传统 LAD 与 VULCAN-CFD 之间，根据图 7 中壁面指标的空间分布计算得到的壁面积分热通量、压力和剪切应力的相对误差。

转弯角 (α)	总热量 flux	压力 沿 x (阻力)	剪切力 沿 x(阻力)	压力 沿 y (升力)	剪切力 沿 y (升力)
$12°$	11.31%	2.95%	8.80%	11.30%	0.06%
$24°$	9.70%	5.04%	0.16%	5.91%	0.14%

揭示了模型中存在可调参数所导致的固有问题。接下来将介绍一种无需调参的方法，以纠正这些不足。

4.2 受限制器启发的局部人工耗散：受赋予TVD性质的通量限制器启发的局部人工耗散

如第 4.1.2 节所述，将传统形式的 LAD 与二阶中心差分结合，可能导致过度的欠冲/超冲以及数值扩散，而且需要针对具体问题进行参数调优。这一缺点促使我们探索一种新型 LAD 方法，该方法受到通量限制器的启发，可赋予 MUSCL 等某些高分辨率格式总变差不增（TVD）性质，旨在为激波可压缩流问题获得无振荡解。这种方法是通过“逆向工程”数值方法所推导出的偏微分方程修改来实现 IAT 的一个例子。下面我们针对一维均匀网格的情形发展这一方法，并在第 4.2.3 节讨论其向多维区域的扩展。

假设我们沿一个维度以正速度（$u > 0$）输运一个标量 ϕ。这可由以下偏微分方程描述：

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = 0, \tag{23}$$

其中，$f \equiv \phi u$ 为对流通量。对计算域进行离散化后，i^{th} 单元右侧面的通量记为 $f_{i+1/2}$，可表示为：

$$f_{i+1/2} = f_i + \frac{1}{2}\psi(r)(f_{i+1} - f_i), \tag{24}$$

其中 r 是通量的迎风侧梯度与背风侧梯度之比，定义为：

$$r = \frac{f_i - f_{i-1}}{f_{i+1} - f_i}, \tag{25}$$

而 $\psi(r)$是确定格式类型的通量限制器函数。例如，$\psi(r) := (r+3)/4$ 对应 QUICK格式 [70]，而 $\psi(r) := (|r| + r)/(1 + r)$对应 van Leer格式 [71]。其他著名的二阶通量限制器包括 minmod [72]、Superbee [72]，和 van Albada [73]。任何有效的二阶精度通量限制器都必须满足若干条件，即：

1. $\psi(r = 1) = 1$，即在解的平滑区域内，格式退化为二阶中心差分 [74]。2. 对于 $r > 0$，$\psi(r)$应落在图8(a)的阴影区域内，以确保满足TVD性质 [74]。3. 对于 $r < 0$，$\psi(r) = 0$，即在局部极值处，格式采用一阶迎风差分（UD）。

关键思路是找到一种偏微分方程修改方式，使得对修改后的偏微分方程进行二阶中心差分离散后，所得离散方程[7] 等同于使用赋予TVD性质的通量限制器对

[7]这里我们仅指空间离散 .

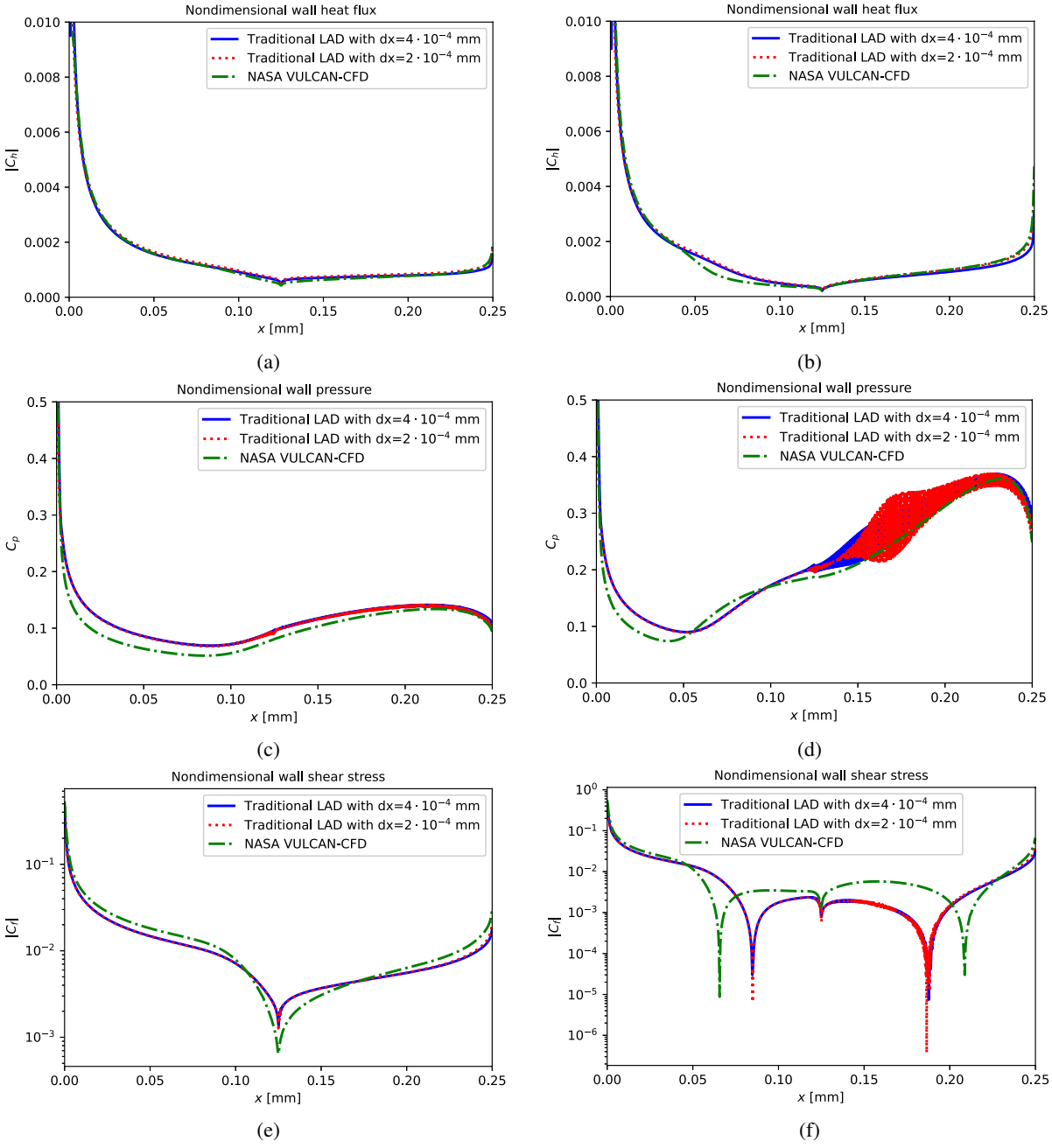


图 7：传统 LAD 与 VULCAN-CFD 的关键壁面指标对比： (a) $\alpha = 12^\circ$ (a) 和 (b) 24° 的无量纲壁面热流；(c) $\alpha = 12^\circ$ 和 (d) 24° 的无量纲壁面压力；以及 (e) $\alpha = 12^\circ$ 和 (f) 24° 的无量纲壁面剪切应力。

原始偏微分方程。基于这一认识，我们可以确定实现稳健、无振荡解所需的关键要素，并据此提出一种偏微分方程修正：采用简单的人工扩散系数局部化方法，该方法具有二阶精度、准总变差递减特性，且无需调参。该方法的示意图见图 8(b)。

从这里开始，为便于书写，我们假设网格均匀，但推广到非均匀网格也很直接。例如，考虑一阶迎风格式（即 $f_{i+1/2} := f_i$）。一阶导数的二阶中心差分算子定义如下：

$$\frac{\partial f}{\partial x}\Big|_{i+1/2}^{\mathrm{CD}} := \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x}, \tag{26}$$

二阶导数则定义为：

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\Big|_{i}^{\mathrm{CD}} := \frac{\partial}{\partial x}\Big|_{i}^{\mathrm{CD}} \frac{\partial f}{\partial x}\Big|_{i}^{\mathrm{CD}} = \frac{\frac{\partial f}{\partial x}|_{i+1/2}^{\mathrm{CD}} - \frac{\partial f}{\partial x}|_{i-1/2}^{\mathrm{CD}}}{\Delta x} = \frac{\frac{f_{i+1}-f_i}{\Delta x} - \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta x}}{\Delta x} = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta x^2}, \tag{27}$$

再结合线性插值（即精度达到二阶），可得：

$$f\Big|_{i+1/2}^{\mathrm{CD}} = \frac{f_{i+1} + f_i}{2}, \tag{28}$$

其中 $\Delta x := (x_{i+1} - x_i) = (x_i - x_{i-1})$。因此，一阶迎风差分算子可表示为：

$$f_{i+1/2}\Big|_{i+1/2}^{\mathrm{UD}} = f\Big|_{i+1/2}^{\mathrm{CD}} - \frac{\Delta x}{2}\frac{\partial f}{\partial x}\Big|_{i+1/2}^{\mathrm{CD}} = (f - \frac{\Delta x}{2}\frac{\partial f}{\partial x})\Big|_{i+1/2}^{\mathrm{CD}}. \tag{29}$$

因此，使用一阶迎风差分计算式（23）的对流面通量，等价于使用二阶中心差分对修改后的偏微分方程进行离散化，其中右端的零被替换为人工通量散度：

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}(D^* \frac{\partial f}{\partial x}), \tag{30}$$

其中人工扩散率为 $D^* = \Delta x/2$，这样用二阶中心差分进行离散化后即可与式（29）吻合。这是一个广为人知的结果：一阶迎风差分等价于在应用二阶中心差分的同时加入依赖网格的人工扩散。注意，扩散作用于通量，而非原始变量 ϕ，因此其单位与常规扩散系数的单位不同。类似地，无需使用式（24）计算对流面通量，而是可以使用二阶中心差分对式（30）中的修改后偏微分方程进行离散化，其中人工扩散率 D^* 为：

$$D^* = \frac{\Delta x}{2}\mathrm{sgn}(u)\big(1 - \psi(r)\big), \tag{31}$$

其中 $\mathrm{sgn}(u)$ 表示流动方向。

为了明确地修改偏微分方程，必须在网格面局部计算 $\psi(r)$。虽然 $\psi(r)$ 是已知的解析函数，但其自变量 r 应由连续运算组合得到。为了用 $x_{i+1/2}$ 处的二阶中心差分运算表示式 (25) 中定义 r 所涉及的非局部通量，除滤波操作外，我们还使用式 (26)–(28)：

$$\overline{f}_i = \frac{1}{4}f_{i-1} + \frac{1}{2}f_i + \frac{1}{4}f_{i+1}, \tag{32}$$

从而得到：

$$f_i = \left(f - \frac{\Delta x}{2}\frac{\partial f}{\partial x}\right)\Big|_{i+1/2}^{\mathrm{CD}}, \tag{33}$$

$$f_{i+1} = \left(f + \frac{\Delta x}{2}\frac{\partial f}{\partial x}\right)\Big|_{i+1/2}^{\mathrm{CD}}, \tag{34}$$

$$f_{i-1} = \left(f + \frac{\Delta x}{2}\frac{\partial f}{\partial x} - 2\Delta x\frac{\partial \overline{f}}{\partial x} + (\Delta x)^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)\Big|_{i+1/2}^{\mathrm{CD}}. \tag{35}$$

将式（33）–（35）代入式（25）可得：

$$r = \left(\frac{2\frac{\partial \overline{f}}{\partial x} - \frac{\partial f}{\partial x} - \Delta x\ \mathrm{sgn}(u)\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}}{\frac{\partial f}{\partial x}}\right)\Big|_{i+1/2}^{\mathrm{CD}}. \tag{36}$$

因此，例如，对于 van Leer 限制器 $\psi(r) := (|r| + r)/(1 + r)$，我们发现人工扩散率 D^* 为：

$$D^* = \frac{\Delta x}{2}\text{sgn}(u)\frac{\frac{1}{2}\frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\partial f/\partial x}{|\partial f/\partial x|}|\frac{\partial \overline{f}}{\partial x} - \frac{\Delta x}{2}\text{sgn}(u)\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - \frac{1}{2}\frac{\partial f}{\partial x}|}{\frac{\partial \overline{f}}{\partial x} - \frac{\Delta x}{2}\text{sgn}(u)\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}}. \tag{37}$$

类似地，可以求得其他通量限制函数（如 minmod 和 Superbee）的扩散率表达式。尽管这种“基于限制器”的 LAD 等效于在原始偏微分方程上应用赋予TVD性质的通量限制器，但它的优点在于能够使用中心空间算子来实现TVD性质，因此这一策略可用于常见的多物理场软件框架，例如 OpenFOAM。

尽管这种基于限制器的方法看似合理，但其公式可能会因所考虑的通量限制器而变得非常复杂。我们注意到，只要满足以下重要限制：(a) $\psi(r = 1) = 1$、(b) $\psi(r \to -\infty) = 0$ 和 (c) $1 \leq \psi(r \to +\infty) \leq 2$，即使这些通量限制器仅近似满足TVD性质，也能保持其鲁棒性。基于此，我们更进一步，设计了一种“受限制器启发”的 LAD 格式，既能避免过度扩散，又采用了更简单的公式。一种方案是使用：

$$\psi(r) := 1 + \tanh\left(\frac{r-1}{\kappa}\right), \tag{38}$$

其中，κ 是一个用于设定双曲正切过渡宽度的超参数。由式（31）和（36）可知，这相当于将 D^* 设为：

$$D^* = \frac{\Delta x}{2}\text{sgn}(u)\tanh\left[2\frac{\frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\partial \overline{f}}{\partial x} + \frac{\Delta}{2}\text{sgn}(u)\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}}{\kappa\frac{\partial f}{\partial x}}\right]. \tag{39}$$

为避免出现负的人工黏性或热传导，并减少振荡，我们对计算得到的扩散率进行截断和滤波，即采用

$$D^* = G\left(\max\left\{\frac{\Delta x}{2}\text{sgn}(u)\tanh\left[2\frac{\frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\partial \overline{f}}{\partial x} + \frac{\Delta x}{2}\text{sgn}(u)\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}}{\kappa\frac{\partial f}{\partial x}}\right], 0\right\}\right), \tag{40}$$

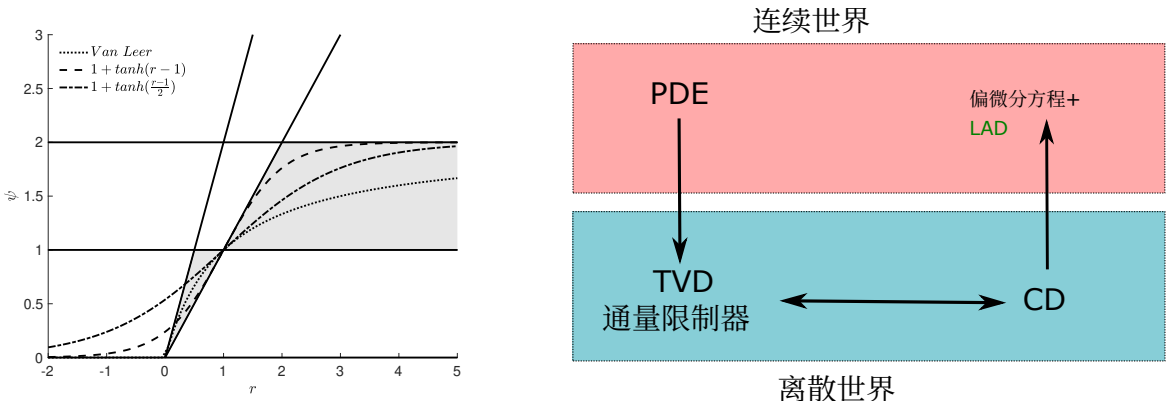
其中，G 是一个高斯滤波器。鉴于人工质量扩散（AMD）没有对应的物理过程，我们对 AMD 使用式（39）以保持尖锐间断（即允许人工质量扩散率为负）。图8(a)展示了 $\kappa = 1$，2 时的 $\psi(r)$ 曲线，可以看出，这两条曲线在 r 的大多数取值下都位于 TVD 区域内。尽管 $\kappa = 1$ 在略大的 r 取值范围内保证了 TVD性质，但我们更倾向于使用 $\kappa = 2$，因为它的扩散性较弱，且足以抑制中心差分引起的振荡。换言之，为了减少对物理振荡的人工扩散，同时保持解的鲁棒性（即避免数值振荡），我们牺牲了对 TVD性质的严格满足。因此，本文所有使用式（39）–（40）得到的结果均采用 $\kappa = 2$。该超参数无需针对具体问题调节，因此这种受限制器启发的方法完全不含针对特定问题的可调参数。原则上，一旦确定了偏微分方程修正，就可以采用不同精度阶数的空间格式，也可以对不同项使用不同的数值格式。

IAT 要求的验证

由于受限制器启发的 LAD 方法以类似于传统 LAD格式（方程（8）–（10））的方式增广可压缩流动方程，因此验证 IAT 要求相当直接。具体而言，第一项要求得以满足，是因为控制方程相同，并且满足守恒原理和热力学一致性。根据方程（31）以及 $\psi(r)$ 对应的 $O(1)$ 值（见图 8），对于受限制器启发的 LAD 模型的扩散率，我们有 $D^* \sim \Delta$。请注意，D^* 作用于通量。考虑到通量依赖于速度的缩放，可以清楚地看出，第二、第三和第四项要求基于与传统 LAD格式相同的推理得以满足。第五项要求得以满足，是因为在远离间断的光滑区域内，ψ 被设计为趋近于 1，从而不会产生人工扩散率。因此，在远离间断处可恢复原始方程，而 Rankine-Hugoniot 跳跃条件表明，局部扩散不会改变间断的速度。最后，第六项要求得以满足，是因为随着网格变细，人工扩散率会减小，增广方程的解将收敛于满足熵条件的熵解。

4.2.2 一维典型问题

现在，我们将式（39）–（40）中提出的受限制器启发的 LAD 模型应用于第 4.1.2 节研究的典型问题，以展示其如何克服上述传统 LAD 的不足。首先，



(a) (b)

图 8：(a) r-ψ 参数空间，其中阴影部分为 TVD 区域；此外还绘出了分别对应 van Leer 通量限制器和在两个不同超参数取值下受限制器启发的 LAD 的曲线。(b) 推导受限制器启发的 LAD 模型的方法示意图。

考虑 Sod 激波管和一维 Shu-Osher。我们对质量方程采用式（39），对动量方程和总能量方程采用式（40）。图 9(a) 展示了 $\Delta x = 0.005$ 和 $\Delta t = 0.0005$条件下 Sod 激波管的结果，而图 9(b) 展示了 $\Delta x = 0.025$ 和 $\Delta t = 0.001$条件下一维 Shu-Osher 测试的结果。这两项结果都明显优于图 2 所示的传统 LAD 模型所得结果。比较两种方法的归一化人工扩散率很有意义。图 9(c、d) 分别比较了 Sod 激波管和一维 Shu-Osher 中，受限制器启发的模型（图 9(a、b)）与传统 LAD 模型（图 2(a、b)）的归一化人工体黏性。有趣的是，与传统 LAD 模型相比，在这两种测试中，受限制器启发的 LAD 在间断附近的光滑区域内作用更强。这可能是为了抑制中心差分（CD）所导致的色散误差，否则这些区域中会出现此类误差。图 9(e、f) 将图 9(a、b) 的结果所用网格加密了 2 倍，以展示受限制器启发的模型所得结果向精确解收敛。

接下来，我们在第 4.1.2 节中介绍的标量平流问题上测试受限制器启发的模型。时刻 $t = 20$ 和 $t = 160$ 的平流结果如图 10(a, b) 所示。我们观察到，在这两个时刻，与 van Leer 限制器、van Albada、minmod 和一阶迎风差分相比，采用二阶中心差分的受限制器启发的 LAD 模型更能保持 ϕ 的轮廓。此外，与传统 LAD 方法（见图 3）相比，所提出的模型在保持 ϕ 轮廓方面有显著提升。最后请注意，该平流问题的解有界；这一性质对于稳健计算可能十分重要。

4.2.3 受限制器启发的 LAD 向多维扩展

在受限制器启发的 LAD 模型中，计算人工通量时使用的是通量的导数，而非原始变量本身的导数，如式（30）中的简单示例所示。因此，该算法的多维扩展并非易事。如第 4.2 节所述，使用 TVD 通量限制器计算对流面通量来求解式（23），等价于使用中差分对带有基于限制器的扩散率的式（30）进行离散，如式（37）中的简单示例所示。现在考虑将式（23）推广到多维情形：

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{f} = 0. \tag{41}$$

我们可以不使用 TVD 通量限制器来计算单元面上的对流通量（$f = \vec{u}\phi$），而改用中心空间算子对式（30）的多维扩展进行离散。不过，我们需要考虑数值网格的拓扑结构。例如，在二维笛卡尔网格上，我们可以使用中心差分进行离散：

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{f} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D_x^* \frac{\partial f_x}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(D_y^* \frac{\partial f_y}{\partial y}\right). \tag{42}$$

对于基于限制器的模型，计算 D_x^* 时需要用到 Δ_x、$\mathrm{sgn}(u_x)$、f_x，以及它们沿 $x-$ 方向的导数，例如可使用式（37）计算 van Leer 限制器和均匀网格单元尺寸；D_y^* 的计算方式类似。或者，也可以通过式（39）–（40）给出的受限制器启发的模型，计算式（42）中的 D_x 和 D_y。

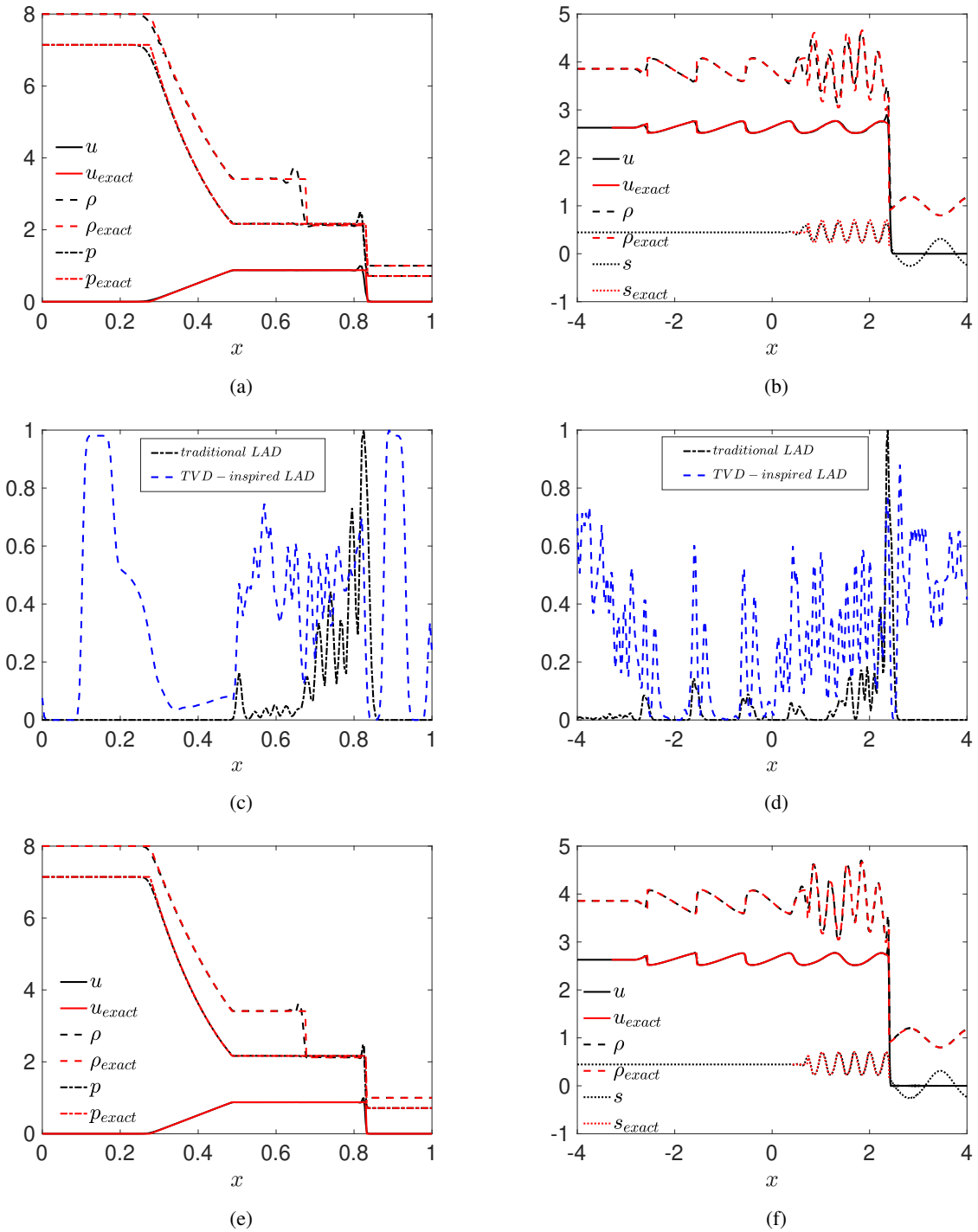
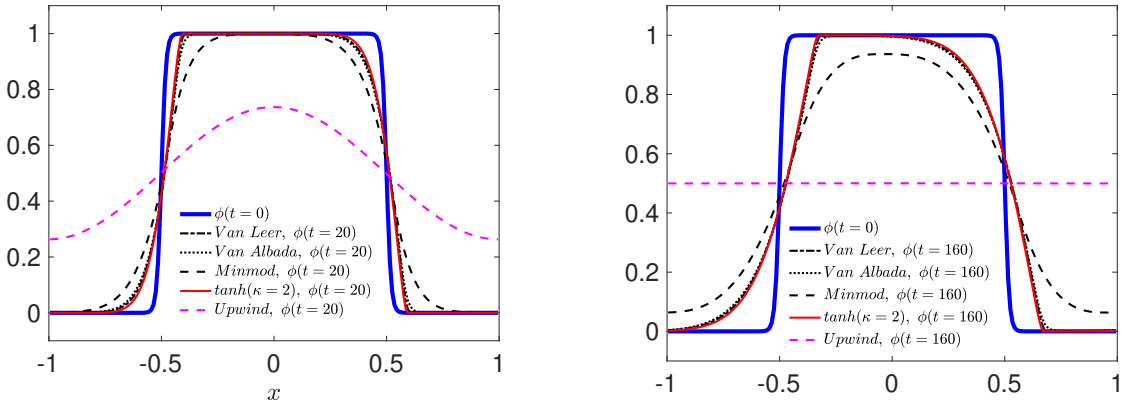


图 9：采用受限制器启发的 LAD 模型（式（39））进行模拟的结果：(a) Sod 激波管和 (b) Shu-Osher。传统 LAD 模型与受限制器启发的 LAD 模型的归一化人工体黏性值对比：(c) Sod 激波管和 (d) Shu-Osher。对 (a, b) 中受限制器启发的 LAD 模型结果进行网格加密（加密系数为 2）后，得到的结果分别为 (e) Sod 激波管和 (f) Shu-Osher。



(a) (b)

图 10：使用 TVD 通量限制器和受限制器启发的 LAD 模型，通过式（23）进行标量平流的结果[式（39）] 绘制于 (a) $t_f = 20$和 (b) $t_f = 160$。

例如，对于 AMD，通过 CD 评估计算受限制器启发的 D_x^*：

$$D_x^* = \frac{\Delta x}{2}\text{sgn}(u_x)\tanh\left[2\frac{\frac{\partial f_x}{\partial x} - \frac{\partial \overline{f_x}}{\partial x} + \frac{\Delta x}{2}\text{sgn}(u_x)\frac{\partial^2 f_x}{\partial x^2}}{\kappa\frac{\partial f_x}{\partial x}}\right], \tag{43}$$

在 $x-$面上，其中 滤波仅涉及 x 方向上的邻居，我们再次假设网格均匀 单元尺寸。类似地， D_y^* 通过对以下内容进行 CD 评估来计算：

$$D_y^* = \frac{\Delta y}{2}\text{sgn}(u_y)\tanh\left[2\frac{\frac{\partial f_y}{\partial y} - \frac{\partial \overline{f_y}}{\partial y} + \frac{\Delta y}{2}\text{sgn}(u_y)\frac{\partial^2 f_y}{\partial y^2}}{\kappa\frac{\partial f_y}{\partial y}}\right], \tag{44}$$

在 $y-$ 面上，其中滤波仅涉及 y 方向上的邻居。

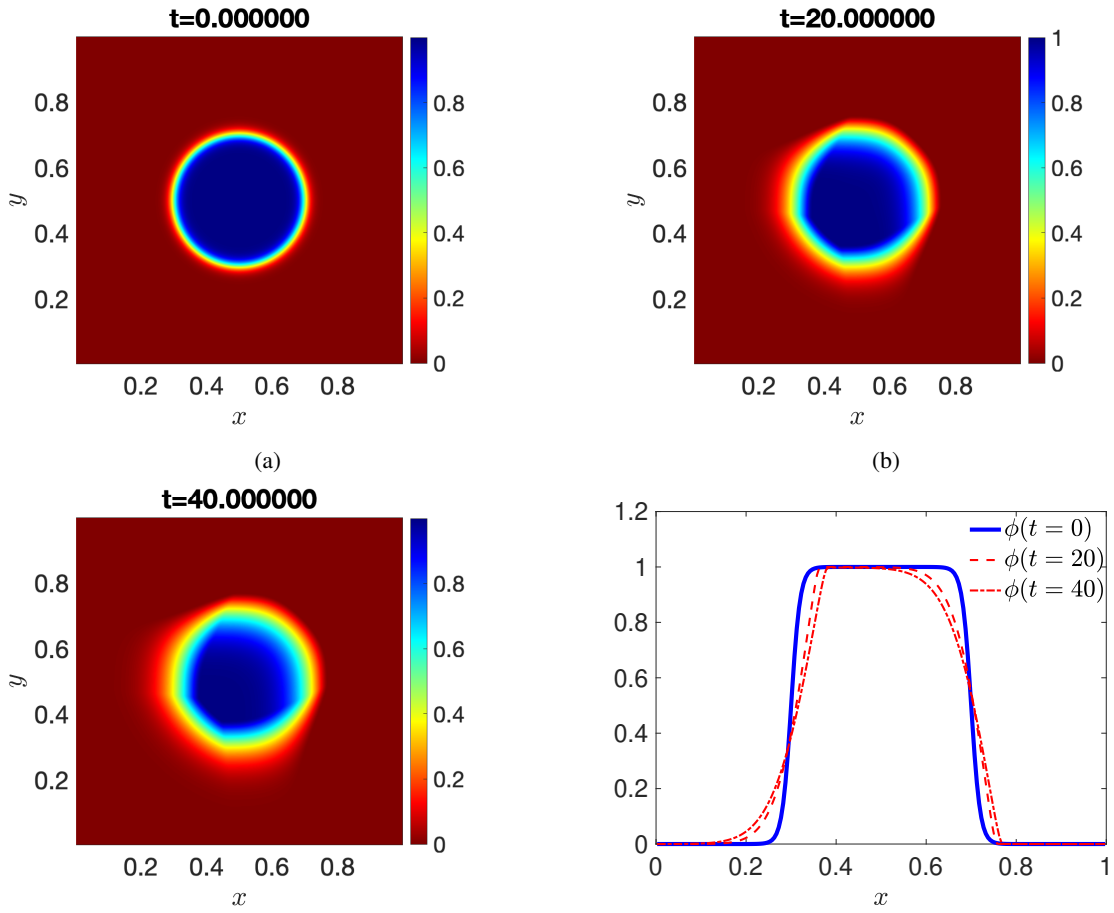
接下来，我们展示如何将式 (42)–(44) 中介绍的基于限制器的 LAD 方法应用于第 4.1.2 节和第 4.2.2 节讨论的标量平流问题的二维版本。显然，上述方法仅适用于笛卡尔网格；更重要的是，不具有旋转不变性。对于适用于结构化网格和非结构化网格的旋转不变公式，我们将留待未来研究。

4.2.4 二维标量平流问题

我们在二维设置下测试第 4.2.3 节提出的受限制器启发的模型的多维版本。为此，我们考虑一个标量平流问题，与第 4.1.2 节和第 4.2.2 节中的测试类似。具体而言，在采用 200×200 网格离散的无量纲 1×1 计算域中，我们将半径为 0.2 的圆盘初始化于 (0.5,0.5)，并以速度 $\vec{u} = (1,1)$ 对其进行平流。初始条件如图 11a 所示。 $t = 20$ 和 $t = 40$时刻的结果见图 11(b, c)。图 11d 展示了 $t = 0,20,40$ 时刻解的截面。从这些结果可以明显看出，多维受限制器启发的 LAD 成功抑制了与中心差分相关的振荡，并产生了与图 10 所示的一维对应版本类似的有界结果。同样，有界解表明了该方法具有鲁棒性。

5 基于 IAT 的策略生成直接可计算模型

美国国防高级研究计划局可计算模型（CompMods）计划旨在推动开发能够产生可直接计算的模型的策略，即能够降低从数学问题表述到数值实现所需工作量（LoE）的方法。此类策略的成功与否通过若干关键指标来衡量，包括可计算性 （即生成可直接使用的数值实现所需的工作量）、可组合性（即整合多个物理组件所需的工作量）、离散守恒 （即确保在数值实现层面实现守恒）、计算效率 （包括负载均衡和可扩展性）、数值精度



(a) (b)

(c) (d)

图11：使用多维限幅器启发的 LAD 模型 [方程（42）–（44）] 求解由方程（41）控制的标量平流，结果绘制于 (a) $t = 0$、(b) $t = 20$、(c) $t = 40$；(d) 则显示解随 x 沿$y = 0.5$线的变化。

以及尺度范围。下文将根据前四项指标[8]评估 IAT，并详细说明 IAT 如何满足每一项指标。

5.1 可计算性

开发先进水平的间断捕捉空间离散格式，例如流体体积法（用于多相流）和 MUSCL/ENO/WENO/TENO（用于可压缩流），历经多年，最终形成了高度专业化的算法。这些方法已被纳入定制求解器，例如美国国家航空航天局的 VULCAN-CFD [69], ，或由领域专家移植到广受欢迎的开源框架 OpenFOAM [75]。这些专家对复杂格式的细节了如指掌。实际上，面对迅速出现的多物理问题时，这会给初级计算科学家快速实现方案设置障碍：他们要么需要熟悉专用框架的手册，要么需要摸索如何将定制库集成到 OpenFOAM 这类开源软件中并使用它们。

相反，IAT 通过在原始控制偏微分方程中加入代表耗散、热传导、间断锐化等效应的人工项，使数值实现能够采用具有不同空间精度的非耗散空间格式，例如中心差分。由此，IAT 使最终用户无需处理与降低和/或调节专用间断捕捉离散格式的耗散相关的复

[8]CompMods 中的各种方法针对构建可直接计算的模型这一总体目标的不同方面。我们的重点主要是降低实现可计算性和可组合性所需的劳动投入，同时通过持续修改控制偏微分方程来确保离散守恒，并在较小程度上提高计算效率。我们没有涉及提高数值精度或扩大计算尺度范围的问题。

杂性，也无需应对学习使用定制求解器或库所涉及的其他难题。此外，IAT 借助网格模板，便于自动将修改后的偏微分方程转换为可由 OpenFOAM 或其他开源框架读取的数值源代码。

我们模拟层流高超声速压缩拐角的研究，是 IAT 能够生成可直接计算的模型的一个具体例证。仅用六个月，我们就推导出了符合 IAT 要求的偏微分方程修正，并生成了 OpenFOAM 源代码；与作为真实值的先进水平（SOA）求解器 VULCAN-CFD 相比，该代码预测的壁面积分热通量、压力和剪切应力的误差在 12% 以内。

5.2 可组合性

面对新兴的多物理场问题，能够轻松地将额外的物理过程组件纳入问题表述，并将其转化为数值实现，至关重要。专用数值算法通常只在有限的适用条件下经过验证，一旦违反其背后的假设，就可能意外失效。纳入额外的物理过程可能需要修改现有控制方程和/或添加新的控制方程，这可能会使某些假设失效，并要求对现有代码进行精准修改，才能使其适用于新场景。这些修改可能耗时，尤其是在需要由不熟悉原始源代码的非专家来完成时。

在 IAT 中，无论是针对现有控制方程还是新控制方程设计额外的人工项，都需要投入额外的劳动投入，并具备物理洞察和专业知识（部分具有通用性，部分则特定于计算域）。不过，在快速响应场景下，可以设想一种并行工作流程：计算科学家使用现成数值方法，对一组初始的修正偏微分方程进行离散化并开展模拟；与此同时，设计原始偏微分方程修正方案的应用数学家团队，则为一组经过修改或扩展的控制方程推导额外的人工项，以反映将更多物理过程组件纳入问题表述的情况。此外，将新的一组修正控制偏微分方程转换为数值源代码，无需对现有的多物理场编译器做重大修改，因为新的一组修正偏微分方程中也会包含类似的算子。因此，我们认为，与用于捕捉流体流动中间断的现成定制空间离散格式（SOA）相比，IAT 在可组合性方面所需的总体劳动投入更低。

5.3 离散守恒

无论是在偏微分方程层面，还是在数值方法/代码中，对间断进行捕捉的修改都必须在耦合方程之间保持一致，以确保不可妥协的基本原理（例如守恒定律）不被破坏。例如，对于多相流，众所周知，质量守恒方程中相界面的人工扩散和锐化应在动量守恒方程中得到一致考虑，从而确保动能守恒能够自动实现 [32, 41, 42, 43, 44]。通过修改方程来强制保持一致性通常较为直接，因为这种方法利用了解析证明。此外，使用标准中心算子可以将守恒等解析性质扩展到离散领域。相比之下，对于 VoF 等复杂格式，要强制保持一致性，就必须考虑复杂的几何算法[44]。

5.4 计算效率

由于 IAT 通过在控制方程中加入人工项，在偏微分方程层面捕捉间断，因此能够在整个计算域内使用中心差分等低成本数值方法，即 IAT 所采用的离散策略与间断的位置无关。与采用复杂数值方法相比，IAT 因此可以显著节省计算开销 [9]

在两相流中，与相场方法不同，流体体积法格式依赖传感器（与体积分数相关）来检测相界面，并在存在此类界面的情况下执行复杂且通常代价高昂的代数和/或几何运算

[9]采用中心差分等无耗散格式对 IAT 引入的额外偏微分方程项进行离散化，在后续模拟中几乎不会增加计算开销。此外，尽管某些项会根据其所依赖参数的数值，仅在间断附近“激活”，但检测间断无需进行任何逻辑运算（例如“if-then-else”语句）。因此，计算工作量能够在整个计算域内均衡分布，使负载均衡变得简单 [22, 32]。

。在这种情况下，间断周围区域的额外计算成本使负载均衡成为一项不简单的任务 [22, 23]。

对于可压缩流，MUSCL 或 WENO/TENO 等常用激波捕捉格式，其参数会在激波/接触间断附近自适应调整，从而使计算成本保持均匀，并确保计算具有可扩展性。然而，光滑度指标的计算以及特征投影的常见用法，使这些格式的成本高于标准中心格式。因此，一些研究者采用混合方法，将这些格式与成本更低、耗散更小的空间格式结合起来，并在间断以外的区域使用后者 [24, 25]。这些修改在数值实现中引入了逻辑判断语句，损害了整体模型的可扩展性。

6 偏微分方程修正的一般策略

第 2.2 节列出了某项偏微分方程修正要被视为 IAT 必须满足的要求。然而，提出偏微分方程修改并非易事；这是一项非传统、非例行的任务，需要专业知识，有时还需要直觉。在本研究中，我们介绍了若干 IAT 实例。相应的偏微分方程修改是通过以下策略实现的，旨在捕捉流体流动中的间断：

1. **从不连续面的热力学所根植的物理现象和方程中汲取灵感，推导唯象模型**。式 (1) 的守恒相场模型（见第 3.1 节）便是采用这一方法，通过改写以范德瓦耳斯状态方程 [40] 为基础的 Allen–Cahn方程推导而来。类似地，可压缩流中的人工扩散率模型最初也是从物理扩散 [56]中汲取灵感而建立的。
2. **借助类比、一致性检验（包括热力学一致性）和物理直觉，假设偏微分方程修正的形式**。这种方法也相当常见，在耦合方程组中尤其有用。一个例子是 [44], , 其中利用动能守恒、约化一致性以及速度的双重含义，推导出动量输运方程的修正项，以确保质量-动量一致性。另一个例子是 [52] 中采用的方法，该方法运用相场方法推导两相流中受限标量输运模型。 3. **假设间断具有合理的微观结构，以推导适用于新物理效应的偏微分方程修正**。这种方法通常依赖解析处理和均匀化，推导偏微分方程修正项与间断两侧变化变量之间的函数关系。在 [53] 中，该方法用于推导采用相场模型仿真两相系统时的热量/质量传递项。 4. **借鉴具有理想性质（例如总变差不增性质、有界性和局部化）的数值方法，反向推导偏微分方程项**。我们在第 4.2 节采用这种方法推导局部化人工扩散率项。请注意，完成这种转换后，用户可以自由使用标准数值方法，同时仍能稳健、准确地捕捉间断。

虽然还可以设想其他设计偏微分方程修改的策略，但上述方案可视为工具箱中的强大且灵活的工具，供对 IAT 方法感兴趣的应用物理学家使用。

7 结论与展望

我们介绍了逆渐近处理（IAT），这是一种策略，可实现对具有动态演化间断的流体流动进行可直接计算的建模。该方法通过修正支配此类流动的偏微分方程（PDE），使得能够使用中心差分（CD）空间算子等标准数值格式来捕捉这些间断。这有助于自动将修正后的偏微分方程转换为可直接计算的数值实现，并在现成的计算框架上运行，例如借助使用网格模板的“多物理场”编译器。

在列出 IAT 的要求后，我们结合两相流阐释了这一策略，强调了它系统性地确保一致性的能力。随后，我们聚焦于单相可压缩流，研究得出了以下主要结论：

1. 使用局部人工扩散率（LAD）可视为 IAT 的一种实现方式：通过人为增厚激波和接触间断，避免使用二阶中心差分等非耗散数值格式所导致的寄生振荡，同时随着人工厚度减小至零，所得数值解将收敛于精确解。

2. 通过数值测试，我们表明，将二阶中心差分与传统 LAD 技术结合使用，可能会在色散误差（欠冲/过冲）与数值耗散之间产生权衡，因此，优化自由参数成为一项困难且依赖具体问题的任务。尽管如此，我们发现，对于二维层流高超声速压缩拐角，在拐角角度较小时，传统 LAD 可得到与美国国家航空航天局的 VULCAN-CFD 相当的结果；对于所考虑的所有拐角角度，其对所有壁面积分指标的预测相对误差均小于 12%。然而，在流动分离和再附位置的预测方面仍存在明显差异，进一步优化自由参数能否提高精度仍是一个有待研究的开放问题。
3. 我们提出了一种受通量限制器启发、无需调参的 LAD 方法。通量限制器可赋予某些高分辨率数值格式总变差不增（TVD）性质。与传统 LAD 相比，这种“受限制器启发”的 LAD 方法在一维标量对流问题以及常用基准算例 Sod 激波管和一维 Shu-Osher 上均表现出更优的性能。最后，我们讨论了这种受限制器启发的方法在笛卡尔网格上的多维扩展，并展示了其在圆盘二维标量对流问题上的表现。

对于未必熟悉特定领域数值格式的新用户而言，IAT 策略尤其具有吸引力。IAT 仍需要一定的专业洞察（部分通用，部分针对特定领域），以便适当地修改控制偏微分方程；不过，领域专家完成这些修改后，专家和非专家都能在自己选择的数值计算平台上安全地使用标准数值方法（例如二阶中心差分）。尽管设计合适的控制偏微分方程修改方案需要付出不小的代价，但从专门数值方法转向标准数值方法，可以通过促进更广泛的计算科学家使用标准数值实现，推动计算普及，从而减少从构思和问题表述到数值模拟所需的工作量和时间。当需要快速应对迅速出现的问题时，这一点尤其有价值，例如快速评估新型高超声速飞行器设计。在这些情况下，IAT 有助于快速迭代数值求解器（包括高阶形式），以适用于各种相互作用的物理场景及相应的设计要求。

致谢

本研究得到美国国防高级研究计划局（DARPA）资助，资助协议编号为 HR00112090065（DARPA可计算模型计划）。

S. Mirjalili 感谢 Jacob West 对本研究早期版本提出的宝贵意见， [76],尤其感谢他建议在可能的情况下对受TVD启发的扩散系数进行截断和滤波。
此外，作者感谢来自美国国家航空航天局的 Matthew D. O’Connell、Nathaniel Hildebrand 和 Meelan Choudhari。他们担任 DARPA可计算模型计划的独立验证与确认（IV&V）团队，为作者提供了压缩拐角挑战问题，并在整个计划期间为改进 IAT 提供了宝贵指导。作者特别感谢 Matthew D. O’Connell 提供美国国家航空航天局 VULCAN-CFD 的结果，以供比较。

参考文献

[1] G. Tryggvason、R. Scardovelli 和 S. Zaleski。《可压缩气液多相流的直接数值模拟》。剑桥大学出版社，2011年。[2] Shahab Mirjalili、Suhas S Jain 和 Micheal Dodd。两相流的界面捕捉方法：概述与最新进展。《湍流研究中心年度研究简报》，第117–135页，2017年。[3] C. W. Hirt 和 B. D. Nichols。用于自由边界动力学的流体体积法（VOF）。《计算物理学杂志》，39(1):201–225，1981年。[4] Feng Xiao、Y Honma 和 T Kono。一种使用双曲正切函数的简单代数界面捕捉格式。《国际流体数值方法杂志》，48(9):1023–1040，2005年。[5] James Albert Sethian。《水平集方法与快速行进法：计算几何、流体力学、计算机视觉和材料科学中的界面演化》，第3卷。剑桥大学出版社，1999年。[6] Elin Olsson 和 Gunilla Kreiss。一种用于两相流的守恒水平集方法。《计算物理学杂志》，210(1):225–246，2005年。[7] D.M. Anderson、G.B. McFadden 和 A.A. Wheeler。流体力学中的弥散界面方法。《流体力学年度评论》，30:139–165，1998年。

[8] Richard Saurel 和 Carlos Pantano。用于可压缩两相流的弥散界面捕捉方法。《流体力学年度评论》，50(1)，2018年。[9] Shahab Mirjalili、Christopher B. Ivey 和 Ali Mani。一种具有可证明有界性性质的两相流守恒弥散界面方法。《计算物理学杂志》，401:109006，2020年。ISSN 0021-9991。[10] G. Tryggvason、B. Bunner、A. Esmaeeli、D. Juric、N. Al-Rawahi、W. Tauber、J. Han、S. Nas 和 Y. J. Jan。一种用于多相流计算的前沿追踪方法。《计算物理学杂志》，169:708–759，2001年。[11] Zhiliang Xu、James Glimm 和 Xiaolin Li。采用自适应加密网格的前沿追踪算法。载于《自适应网格加密：理论与应用：芝加哥自适应网格加密方法研讨会论文集》，2003年9月3–5日，第83–89页。施普林格，2005年。[12] Najeeb Ahmad、Muhammad Nufail Farooqi、Didem Unat 等。并行多相流模拟的负载均衡。《科学编程》，2018年，2018年。[13] J. Herrera-Montojo、M. Fossati 和 E. Minisci。用于超声速状态气动分析的激波贴体网格生成。《计算流体力学》，157:276–293，2017年。[14] G. Moretti。具有任意数量嵌入式激波的三维超声速定常流。载于第12届航空航天科学会议论文集，第10页。第12届航空航天科学会议，1974年。[15] R. Marsilio 和 G. Moretti。管道中二维无黏定常超声速流的激波拟合方法。《力学》，24(4):216–222，1989年。[16] Bram Van Leer。迈向终极守恒差分格式。V. Godunov 方法的二阶后续格式。《计算物理学杂志》，32(1):101–136，1979年。[17] A. Harten、B. Engquist、S. Osher 和 S. R. Chakravarthy。均匀高阶精度本质无振荡格式，III。《计算物理学杂志》，71(2):231–303，1987年。[18] X.-D. Liu、S. Osher 和 T. Chan。加权本质无振荡格式。《计算物理学杂志》，115:200–212，1994年。[19] Lin Fu、Xiangyu Y Hu 和 Nikolaus A Adams。一类用于可压缩流体模拟的高阶目标型 ENO 格式。《计算物理学杂志》，305:333–359，2016年。[20] Andrew W Cook 和 William H Cabot。用于激波-湍流相互作用的超黏性。《计算物理学杂志》，203:379–385，2005年。[21] Ali Mani、Johan Larsson 和 Parviz Moin。人工体积黏性用于含激波湍流大涡模拟的适用性。《计算物理学杂志》，228:7368–7374，2009年。[22] Shahab Mirjalili、Christopher B Ivey 和 Ali Mani。用于模拟两相流的弥散界面方法与流体体积法的比较。《国际多相流》，116:221–238，2019年。[23] Lluís Jofre、Ricard Borrell、Oriol Lehmkuhl 和 Assensi Oliva。三维非结构网格上流体体积法的并行负载均衡策略。《计算物理学杂志》，282:269–288，2015年。[24] Zhuang Zhao、Jun Zhu、Yibing Chen 和 Jianxian Qiu。一种新的双曲守恒律混合 WENO 格式。《计算机与流体》，179:422–436，2019年。[25] Sergio Pirozzoli。用于激波-湍流相互作用的守恒混合紧致 WENO 格式。《计算物理学杂志》，178(1):81–117，2002年。[26] C. W. Shu 和 S. Osher。本质无振荡激波捕捉格式的高效实现 II。《计算物理学杂志》，93:32–78，1989年。[27] Guang Shan Jiang 和 Chi Wang Shu。加权 ENO 格式的高效实现。《计算物理学杂志》，126:202–228，1996年。ISSN 00219991。doi:10.1006/jcph.1996.0130。[28] Arpit Tiwari、Jonathan B Freund 和 Carlos Pantano。一种保持不混溶性的弥散界面模型。《计算物理学杂志》，252:290–309，2013年。[29] Kevin Schmidmayer、Spencer H Bryngelson 和 Tim Colonius。对球形气泡动力学的多组分流动模型与界面捕捉格式的评估。《计算物理学杂志》，402:109080，2020年。[30] COMSOL AB，瑞典斯德哥尔摩。COMSOL Multiphysics v. 6.1。网址 https://www.comsol.com。[31] H. Jasak、A. Jemcov 和 Z. Tukovic。OpenFOAM：一种用于复杂物理模拟的 C++ 库。载于数值动力学耦合方法国际研讨会（IUC）论文集，克罗地亚杜布罗夫尼克，2007年9月19–21日。

[32] Suhas S Jain、Ali Mani 和 Parviz Moin。用于可压缩两相流的守恒弥散界面方法。《计算物理学杂志》，418:109606，2020年。[33] Makrand A Khanwale、Alec D Lofquist、Hari Sundar、James A Rossmanith 和 Baskar Ganapathysubramanian。基于并行自适应八叉树网格，使用热力学一致且能量稳定的 Cahn–Hilliard–Navier–Stokes方程模拟两相流。《计算物理学杂志》，419:109674，2020年。[34] Soshi Kawai、Santhosh K Shankar 和 Sanjiva K Lele。局部人工扩散率格式在可压缩湍流大涡模拟中的评估。《计算物理学杂志》，229:1739–1762，2010年。[35] H Collis、S Mirjalili、SS Jain 和 A Mani。含正则化项的四方程可压缩两相流模型中 WENO 和 TENO 格式的评估。《湍流研究中心年度研究简报》，第151–165页，2022年。[36] A. Harten。双曲守恒律的高分辨率格式。《计算物理学杂志》，49(2):357–393，1983年。[37] Ferdinand Verhulst。奇异摄动的方法与应用。施普林格，2005年。[38] Paco Axel Lagerstrom。匹配渐近展开：思想与技巧，第76卷。Springer Science & Business Media，2013年。[39] L Gary Leal。高级传递现象：流体力学与对流传递过程，第7卷。剑桥大学出版社，2007年。[40] Pao-Hsiung Chiu 和 Yan-Ting Lin。用于求解不可压缩两相流的守恒相场方法。《计算物理学杂志》，230(1):185–204，2011年。[41] Hiroshi Terashima、Soshi Kawai 和 Mitsuo Koshi。用于模拟可压缩多组分流的相容数值扩散项。《计算机与流体》，88:484–495，2013年。[42] Takanori Haga 和 Soshi Kawai。关于一种适用于高阶通量重构方法的稳健且精确的局部人工扩散率格式。《计算物理学杂志》，376:534–563，2019年。[43] Ziyang Huang、Guang Lin 和 Arezoo M Ardekani。用于 n 相 m 组分不可压缩流的相容且守恒模型及其格式。《计算物理学杂志》，434:110229，2021年。[44] Shahab Mirjalili 和 Ali Mani。利用相场方程模拟两相流时一致且能量守恒的动量输运。《计算物理学杂志》，426:109918，2021年。[45] J Blair Perot。非结构网格格式的离散守恒性质。《流体力学年度评论》，43(1):299–318，2011年。[46] Helmut Abels、Harald Garcke 和 Günther Grün。适用于不同密度不可压缩两相流的热力学一致、坐标系无关弥散界面模型。《应用科学中的数学模型与方法》，22(03):1150013，2012年。[47] Junseok Kim、Seunggyu Lee 和 Yongho Choi。带时空相关拉格朗日乘子的守恒Allen–Cahn方程。《国际工程科学杂志》，84:11–17，2014年。[48] Shuying Zhai、Zhifeng Weng 和 Xinlong Feng。非局部Allen–Cahn方程若干数值方法的研究。《国际传热与传质杂志》，87:111–118，2015年。[49] Darae Jeong 和 Junseok Kim。用于不可压缩两相流的守恒Allen–Cahn–Navier–Stokes系统。《计算机与流体》，156:239–246，2017年。[50] Vaibhav Joshi 和 Rajeev K Jaiman。用于两相流相场建模的保正守恒变分格式。《计算物理学杂志》，360:137–166，2018年。[51] Ziyang Huang、Guang Lin 和 Arezoo M Ardekani。使用守恒Allen-Cahn模型求解不可压缩两相流的相容守恒格式。《计算物理学杂志》，420:109718，2020年。[52] Suhas S. Jain、K. Kamrin 和 Ali Mani。用于模拟流体中软固体的守恒非耗散欧拉表述。《计算物理学杂志》，399:108922，2019年。[53] Shahab Mirjalili、Suhas S Jain 和 Ali Mani。使用相场方法模拟两相流中界面热质传递的计算模型。《国际传热与传质杂志》，197:123326，2022年。[54] John Von Neumann 和 Robert D Richtmyer。流体动力学激波数值计算的一种方法。《应用物理学杂志》，21:232–237，1950年。[55] Benoit Fiorina 和 Sanjiva K Lele。适用于含激波超声速反应流的人工非线性扩散率方法。《计算物理学杂志》，222:246–264，2007年。

[56] Andrew W Cook。用于可压缩湍流混合大涡模拟的人工流体性质。《物理流体》，19:055103，2007年。[57] Soshi Kawai 和 Sanjiva K Lele。用于曲线网格间断捕捉的局部人工扩散率格式。《计算物理学杂志》，227:9498–9526，2008年。[58] Eric Johnsen、Johan Larsson、Ankit V Bhagatwala、William H Cabot、Parviz Moin、Britton J Olson、Pradeep S Rawat、Santhosh K Shankar、Björn Sjögreen、Helen C Yee 等。用于含激波可压缩湍流数值模拟的高分辨率方法评估。《计算物理学杂志》，229:1213–1237，2010年。[59] Chin Yik Lee 和 Sanjiva K Lele。用于爆燃和爆轰波的局部人工扩散率格式。《计算流体力学》，159:33–52，2017年。[60] P Moin 和 R Verzicco。二阶精度离散是否适用于湍流模拟。《欧洲力学杂志B辑：流体》，55:242–245，2016年。[61] Antony Jameson。气体动力学中动能保持守恒格式的构造，以及在激波管中使用熵与动能保持格式对一维黏性可压缩流进行直接数值模拟。《科学计算杂志》，34(2):188–208，2008年。[62] G. A. Sod。非线性双曲守恒律组若干有限差分方法综述。《计算物理学杂志》，27:1–31，1978年。[63] J. D. Anderson。现代可压缩流：历史视角。麦格劳-希尔教育，第4版，2020年。[64] T. B. Gatski 和 J.-P. Bonnet。《可压缩性、湍流与高速流动》。学术出版社，第2版，2013年。[65] FT Smith 和 A Farid Khorrami。超声速斜坡流中的相互作用破裂。《流体力学杂志》，224:197–215，1991年。[66] GL Korolev、JSB Gajjar 和 AI Ruban。再论拐角附近的超声速流动分离。《流体力学杂志》，463:173–199，2002年。[67] Vladimir Viktorovich Shvedchenko。关于气流越过压缩斜坡时的二次分离。《TsAGI科学杂志》，40(5)，2009年。[68] E. R. Shellabarger。层流高超声速流中平板和压缩斜坡上激波–边界层相互作用的计算表征。博士论文，爱荷华州立大学，2018年。[69] 美国国家航空航天局。VULCAN-CFD求解器。https://vulcan-cfd.larc.nasa.gov/，2021年。[70] Brian P Leonard。一种基于二次上游插值的稳定且精确的对流建模方法。《计算方法与应用力学和工程》，19:59–98，1979年。[71] B. van Leer。迈向终极守恒差分格式。II. 单调性与守恒性在二阶格式中的结合。《计算物理学杂志》，14(4):361–370，1974年。[72] Philip L Roe。欧拉方程的特征型格式。《流体力学年度评论》，18:337–365，1986年。[73] G. D. van Albada、B. van Leer 和 W. W. Roberts。《迎风格式与高分辨率格式》，章节《宇宙气体动力学中计算方法的比较研究》，第95–103页。施普林格柏林海德堡，柏林，海德堡，1997年。[74] Peter K Sweby。使用通量限制器求解双曲守恒律的高分辨率格式。《SIAM数值分析杂志》，21:995–1011，1984年。[75] J.W. Gärtner、A. Kronenburg 和 T. Martin。适用于 OpenFOAM 的高效 WENO库。《SoftwareX》，12:100611，2020年。[76] S Mirjalili、S Taverniers、H Collis、M Behandish 和 A Mani。一种受TVD格式启发的局部人工扩散率方法及其在可压缩流中的一致应用。湍流研究中心，斯坦福大学，第169–182页，2021年。