

计算流体力学的新方向及其 在工业上的应用

陈耀松^{①*} 单肖文^② 陈沪东^②

(^① 北京大学力学与工程科学系, 北京 100871; ^② Exa Corporation, USA)

摘要 计算流体力学在近十几年有了长足的进展, 其中尤其值得一提的是此领域的一个重要新兴方向, 即所谓格子玻尔兹曼方法的形成和发展. 在此就这一方法的主要精髓和最新进展提供一个概述. 同时也就相关的科技软件开发和它在实际工业应用中所带来的影响进行一下讨论.

关键词 格子方法 玻尔兹曼方程 计算流体力学

随着计算机能力的突飞猛进, 尤其是大规模并行计算的产生, 人们越来越感受到利用计算模拟手段解决科技工程问题的可行性和必要性. 流体力学作为一门经典学科, 也从中得到了新的生命力. 流体力学的应用领域遍及基础工业的各个方面, 除了航空航天、气象预报和油气开采等领域外, 还包括汽车车型空气动力学优化、风扇及运动物体空气噪音源的分析 and 降低、热对流及热传输对于器件乃至环境的影响等, 不一而足. 随着新兴工业的诞生, 流体力学的应用也扩展到微流、多相流、非牛顿流以及其他复杂流体. 而随着计算机功能的飞速发展, 人们运用计算流体力学对重要科学和工程课题实行大规模计算模拟已经形成世界新兴高科技研发的发展方向.

计算流体力学的实际应用使得人们能对流体的物理机制取得许多以往经典方法不可能达到的认识程度. 这不仅对于高效率低消耗的新科技研发有着重要的影响, 同时对于更深入地了解乃至优化工程设计都有着关键性的意义. 例如, 飞机在大攻角飞行或在机动飞行的情况下, 传统的风洞试验手段很难取得有关流体效应复杂现象的细节认识, 在许多情况下这些关键细节是用实验手段无法测量的, 然而, 根据对流体基本物理的理解, 我们知道流体的特性往往可能由于某个细小的变化而发生质的改变, 而且风洞试验存在着实验周期长, 价格昂贵等缺点, 所有这些因素限制了风洞试验手段对气动外形设计所能起到的作用. 因此, 准确而快捷的计算流体方法能使我们对于流体力学问题的认识从“知其然”到“知其所以然”, 给设计人员提供及时准确的反馈, 从而对产品的优化和新技术的研发起着举足轻重的作用.

收稿日期: 2007-05-14; 接受日期: 2007-07-30

本文由顾颂芬编委推荐

* E-mail: chenys@pku.edu.cn

流体力学的理论描述通常建立在纳维-斯托克斯(Navier-Stokes)方程的基础上. 作为流体力学的基石, 它已存在了一个多世纪, 在通常尺度下, 人们对此方程的物理可靠性及准确性并不抱异议. 在各个学术研究机构, 流体力学研究也主要是围绕纳维-斯托克斯方程展开的. 理论上人们一般通过求解纳维-斯托克斯方程及其各种简化形式的途径来处理复杂的流体力学问题, 现行的计算流体力学研究也主要是围绕着纳维-斯托克斯方程的计算方法展开的, 然而, 基于其本质上的非线性以及边界条件处理的困难, 除少数简单问题外, 解析和数值求解纳维-斯托克斯方程都是极具挑战性的任务. 证明纳维-斯托克斯方程解的存在性和光滑性仍然是克雷数学研究所(Clay Mathematics Institute)悬赏征解的世纪难题之一.

除了求解的困难外, 作为一种对流体物理的描述, 与描述经典力学运动的牛顿运动方程, 或与描述量子力学运动的薛定谔方程等原理性方程不同, 纳维-斯托克斯方程是从更根本的原理性方程出发, 在合理地假定某些物理机制可以忽略后, 经过统计平均得到的. 本质上纳维-斯托克斯方程当然不可能描述那些被忽略了的物理机制带来的宏观现象, 比如流体系统中的相变、非牛顿的本构关系以及在分子运动自由程尺度上的物理现象. 当今科技的高速发展已使人们的视野扩展到比传统流体力学更为广泛的物理现象, 如微尺度流动和复杂流体的认识和理解. 在这些领域, 纳维-斯托克斯方程明显的显示出了它的局限性. 同时, 由于当今计算机能力的限制, 流体物理现象, 如湍流, 往往不能用直接模拟(direct numerical simulation)即精确解纳维-斯托克斯方程的方式实现. 因此, 人们往往也必须辅加各种物理近似模式, 其中最通常和最可行的是所谓涡粘滞系数模式(eddy-viscosity modeling)^[1].

由于种种此类原因所导致的疑难、不确定性及误差, 计算流体力学在科技领域尤其是实际工程中的应用方面尚未能取代试验. 尽管如此, 计算流体力学已成为当今发展最快的一门学科. 它不仅已经对科学技术创新乃至工程应用发挥着不可忽视的作用, 同时它本身也代表了世界上新兴工业的发展方向: 高科技软件工业.

从 20 世纪 80 年代末开始, 一种对于流体力学的全新的理论表象及有效的计算方法初步形成. 这就是现在人们通常所谓的格子玻尔兹曼方法. 在过去 20 年的发展历程中, 人们对于这一方法的认识经历了曲折的过程, 并有了长足的进步. 尤其是近几年, 人们对于其理论本质的理解有了质的飞跃. 同时它从一个学术界的理论模型, 逐步演化完善, 发展成为具有实际工程应用使用价值的计算软件, 从而在一些主要支柱工业的新产品研发中得到使用^[2]. 例如, 世界上现在几乎所有的汽车制造公司都在运用基于格子玻尔兹曼方法的计算流体力学软件优化新车型的气动性能. 随着该方法的进一步扩展和提高, 我们相信它会在更广泛的领域得到应用.

1 格子玻尔兹曼方法及其新进展

流体力学是用连续介质模型依托数学分析方法而形成的. 电子计算机促使计算数学的形成, 相应地形成计算流体力学(computational fluid dynamics, CFD). 早期, 由于计算技术发展水平所限, CFD 的最高目标是直接解纳维-斯托克斯方程. 玻尔兹曼方程式是比纳维-斯托克斯方程更为基本的反映流体机理的模型方程, 由于计算技术的迅猛发展和格子算法的成功, 从而在计算流体力学中发展了格子玻尔兹曼方法. 借助它, 如今计算流体力学已可分析诸多纳维-斯托克斯方程无法刻画的流体运动现象.

关于格子玻尔兹曼方法的早期发展, 文献中已有较全面的综述, 在此我们仅作简单介绍.

从历史角度来讲, 格子玻尔兹曼方法最初是从所谓的格子气模型演化而来的^[3,4], 而后者是一种抽象简化的分子运动数学模型. 对于每个格子气模型而言, 粒子只能生活在一个离散的相空间里, 它的粒子分布、速度和空间位置都只能以整数形式存在. 格子气模型与实际流体物理的联系建立在这样的物理假设上: 即不同微观细节的物理系统可以对应相同的宏观行为. 如水和空气, 它们的微观物理很不一样, 但它们在低马赫数及常规尺度情况下的宏观运动方式都近似地满足纳维-斯托克斯方程. 由此, 人们希望建立像格子气模型这样的最简单的数学模型来达到描述复杂宏观现象的目的. 同时, 数值模拟格子气这类模型是十分容易的, 这也就给解流体力学问题提供了一种简洁有效的途径. 而格子玻尔兹曼方法最初的引入有两个主要原因, 一是为了降低整数模型导致的数值噪音^[5]; 二是能够克服格子气模型里存在的非物理缺陷^[6-8]. 的确, 当适当的粒子平衡态分布选定之后, 可以证明, 格子玻尔兹曼系统的宏观表像基本满足纳维-斯托克斯方程. 从而, 人们可以用模拟格子玻尔兹曼系统的方法来间接地解纳维-斯托克斯方程.

标准格子玻尔兹曼方程一般用以下的数学表达式描述:

$$f_a(x + \xi_a dt, t + dt) = f_a(x, t) + C_a(f), \quad (1)$$

其中 f_a 代表粒子分布函数; C_a 代表碰撞项. 上面各项的下角标表示某个给定的粒子离散速度值. 为了简洁起见, 通常人们采用单位常规定义. 碰撞项最常用的形式是所谓的BGK^[9]模型:

$$C_a(f) = -\frac{f_a - f_a^{eq}}{\tau}, \quad (2)$$

其中 f_a^{eq} 代表平衡态分布; τ 代表通过碰撞使粒子分布向平衡态趋近的迟滞时间. 在早期的格子玻尔兹曼方法中, 平衡态分布为一含若干待定系数的小马赫数展开式. 展开系数由逆向切普曼-安斯柯格(Chapman-Enskog)给定. 可以证明, 当离散速度集 ξ_a 满足一定对称性要求时, (1)式所代表的系统在宏观上基本满足纳维-斯托克斯方程.

用格子玻尔兹曼模型进行流体的数值模拟有一些明显的优越性. 如, 它的对流(advection)过程是通过常数值速度实现的. 这相应的计算是一项极其简单的操作步骤. 当适当的格子网格选定后, 该过程通常可以用完全平移的方式实现. 用计算数学里的常规有限插值语言来讲, 它对应于上风插值. 但所不同的是其对应的柯朗数(Courant Number)等于1. 相比之下, 纳维-斯托克斯方程的对流项是一个随时空变化的非线性函数. 众所周知, 对于它的计算不是一项简单的事, 并且, 数值稳定性的要求迫使人们在实际问题的计算中只能使用比1小得多的柯朗数. 在给定空间分辨率的情况下, 小柯朗数意味着小时间步长, 从而大大延长了计算时间; 同时, 小柯朗数也增大了数值扩散误差, 迫使人们采用更高精度格式或隐式格式. 其后果是, 或者算法变得极为复杂, 并行效率大大降低; 或者计算只限制在处理定常流的情况下. 事实上, 定常流是对流动情况的极大限制. 许多重要的流体力学问题, 如分离流, 即使我们只关心它的时间平均的结果, 也是不能用定常流假设来近似的. 在此我们也要提一下格子玻尔兹曼方程的另一个本质特性: 所有非线性效应在格子玻尔兹曼方法里都包含在碰撞项中, 并且是以纯粹局部信息的方式体现的. 这进一步发挥了并行计算的长处. 所有这些理由意味着格子玻尔兹曼方法是对非定常流动实行大规模并行模拟计算的一种比较优越的方法.

然而, 这种为大多数人所熟悉的格子玻尔兹曼方法的理论框架存在本质上的缺陷. 由于它运用逆向切普曼-安斯柯格展开的途径来适定平衡态分布函数中的关键参数, 以达到复建宏

观物理体系的目的,这就使其对比纳维-斯托克思方程更为广泛的流体物理问题变得束手无策.因为后者通常缺乏明确的宏观表述方程.除了这一限制外,大多数通常所知的格子玻尔兹曼模型还存在着其他明显的局限,如它的离散速度集只能达到四阶各项同性的要求,而其平衡态分布也只能适用于极低马赫数下,温度近似为常数的情况,这就限制了格子玻尔兹曼方法在可压缩流动模拟中的应用.在这里我们也顺便提一下和此有关的在学术领域中的思想谬误.这种谬误把格子玻尔兹曼方法和某些通常意义下特定的格子玻尔兹曼模型混为一谈,从而得出该方法只能适用于处理近似不可压及恒温纳维-斯托克思流体问题的错误结论.

近几年来,通过对流体物理宏观表示形式的深入探索,我们对格子玻尔兹曼方法的认识有了质的提高.众所周知,对多体系统的统计物理描述,可以追溯到 N 粒子的哈密顿方程,及描述 N 体联合概率分布的 Liouville 方程,在牛顿力学的范畴内,它们可以看作是精确的.对多体碰撞的效应作一些假设,流体运动可以用单粒子在六维相空间的分布函数及其控制方程,即玻尔兹曼方程来描述.人们通常关心的物理量,如流体的密度、速度和温度等都是分布函数在速度空间的低阶矩.人们通常熟悉的流体力学方程,如欧拉方程和纳维-斯托克思方程则分别是连续玻尔兹曼方程在平衡态附近的零阶和一阶近似解,可以通过切普曼-安斯柯格逐级展开得到.用统计物理的语言,分布函数中偏离平衡态分布(麦克斯韦-玻尔兹曼分布)的部分在欧拉方程中被完全忽略,在纳维-斯托克思中只保留了线性部分,而玻尔兹曼方程本身则包含了所有阶的非平衡态贡献,对流体力学的描述更具有普适性.在流体远离平衡态的情况下,如流体在 Knudsen 和高马赫数流动的情形,这种普适性十分重要.

然而,在现有的计算条件下,六维分布函数包含的信息不仅远远超出了计算机所能处理的信息量,也远远超出了对实际问题直接有关的信息.通过求解玻尔兹曼方程来解决流体力学问题既不实用,也无必要,对实际问题起作用的仅仅是分布函数的低阶矩.由此引发了人们希望寻找有效地将连续玻尔兹曼方程用其低阶矩来描述的想法.半个世纪以前,Grad^[10]首先提出了将分布函数用厄密多项式展开,并在谱空间截断后求解的思想.厄密多项式构成了速度空间的一组完备正交基,任意分布函数在由厄密多项式张成的希尔伯特空间中的坐标正对应于其各阶矩,因此,在厄密空间内对分布函数的截断并不会对低阶矩的计算带来任何误差.由此,Grad 导出了其著名的十三矩流体力学模型.

尽管由于其复杂性,Grad 十三矩模型不能直接提供高效的计算方法,但它对重新认识并拓展格子玻尔兹曼方法提供了关键的启示.即格子玻尔兹曼方法可以理解为等价于连续玻尔兹曼方程的有限阶厄密多项式展开^[11,12].当所要取的前 N 阶项给定之后,其低阶矩可以用分布函数的离散值通过高斯-厄密积分来精确表示,而这些离散值恰恰形成了格子玻尔兹曼系统中的离散粒子速度.格子玻尔兹曼的这种全新的描述框架不仅能给予已知的格子玻尔兹曼模型另一种解释,更重要的是它系统地提供了推导高阶模式的程序.的确,通常所知的格子玻尔兹曼模型如 D3Q15 或 D3Q19 对应于二阶厄密展开,更高阶的格子玻尔兹曼模型便可自然给出.这对于正确描述流体有限马赫数下的热运动以及对于有限努逊效应开启了有效途径,而后的物理机制是位于纳维-斯托克思方程描述之外的.值得强调的是,这种对格子玻尔兹曼方法的全新描述框架完全不依赖于是否存在对应的宏观方程描述.从相应的高斯积分可知,截断的阶数越高,对应的速度离散值总数就越大.不同阶的模型自动涵括了其相对应的高阶流体矩乃至高阶非平衡态的物理效应,它并不牵扯到宏观描述封闭性(closure)的问题.这里也顺便提一下,该种全新方法不仅对平衡态分布的解析形式作出了明确定义,它同时也对非平衡态部分

及其演化在厄密空间提供了严格描述, 由此给出了在物理上更合理, 计算上更有效的“多迟豫时间”(MRT)和可调普朗特数模型^[13,14]. 玻尔兹曼方程的这些最新进展给用此方法计算热流动、高努逊数流动以及有限马赫数流动打开了可行性的的大门.

相比之下, 以流体力学方程(纳维-斯托克斯方程或Burnett类型方程)宏观描述为基础的传统计算方法对许多这类问题存在基本困难. 除边界条件之外, 利用各种封闭性假设推导出的超越纳维-斯托克斯的宏观方程直至今今仍存在对其数学规范性的疑问和争议, 多相流的计算也存在同样问题. 众所周知, 流体系统中存在多相的物理机制是分子间的长程作用力, 这种机制早已超出了流体力学方程所能描述的物理现象范围. 以流体力学方程为基础的多相流计算方法必须依赖额外的模型来模拟流体力学方程本身所不包含的物理现象. 除了实际数值结果显示的问题之外, 这种方法本质上隐含着严重的基本物理缺陷, 这种缺陷集中表现在对相交界面的准确描述上面, 即在十分尖锐的相界面附近, 纳维-斯托克斯方程之类近平衡态的近似表象是有相当疑问的. 这也反映在相界面和无滑动(no-slip)固体边界条件的互斥性上面, 为了修补这一缺憾, 人们不得不引入各种滑动经验模型. 反之, 以细观(mesosopic)为表象基础的格子玻尔兹曼方法可容忍更大的非平衡态程度及更广义的严格边界条件. 另外, 压力的状态方程在细观表象中是由粒子的相互作用自然得出的, 而不用直接输入和处理. 在相变情况下, 物体的宏观特性将产生不连续性, 而对应的微观和细观力学机制并无改变. 格子玻尔兹曼方法在模拟多相流上有着广泛的使用^[15,16].

2 玻尔兹曼方法在计算流体力学中的运用

林家翘先生多次在国内解释“应用数学”的使命. 他在纪念周培源诞生100周年大会上给出了“广义应用数学”明确概念: “为研究对象建立适当的数学模型→用数学方法(包括求解)对科学课题作出预测, 很有可能需要创造新的数学模型→回到原来的实际问题去解释问题”. 电子计算机以及相应计算方法的出现大大扩展了“广义应用数学”中间一环, 大量当年由于数学困难而受阻只得求之于试验的任务如今已可用计算来完成.

经过多年的努力, 格子玻尔兹曼方法的理论研究得到长足发展. 在这方面的文章浩如烟海, 较早期的工作可从其综述文章中寻找^[17]. 但正像以上所说, 在此之后又经历了质的飞跃, 同时也有许多是用该方法与试验数据或其他方法比较^[18]. 所有这些表明, 尽管尚待进一步完善, 格子玻尔兹曼方法已证明是对流体力学准确有效的计算方法, 与此同时以格子玻尔兹曼方法为核心的计算软件现也已在实际工程中并在其新产品研发上起着不可忽视的作用, 这也是和以上所说的既成和潜在优点分不开的, 其中最主要的原因是它能对非时稳流动问题进行快速大规模并行计算, 除此之外, 我们认为格子玻尔兹曼方法至少还有以下几个明显特点.

(i) 由于具有柯朗数等于1的特性, 它的数值误差比简单同阶差分格式小得多, 从而在相同网格分析度的情况下, 它能捕获更微小的涡流行为. 这给计算高雷诺(Reynolds)数流动问题提供了优越性. 根据量纲估算, 直接解流体问题对空间各维需要的分析度是其雷诺数值的量级, 而对湍流模式或大涡模拟的计算, 空间分析度的要求也至少在雷诺数平方根的量级. 通常实际的工程问题的雷诺数往往是百万量级, 它意味着无法对三维流体问题实行直接模拟, 即使是用大涡模拟, 这个数字对现今的计算机也是不切实际的. 因此如果某种计算方法能够容纳较高的分辨率, 那它即成为较好的选择.

(ii) 格子玻尔兹曼对于复杂几何形状的边界条件处理有许多优点^[19]. 首先, 它的常速对

流特性使近壁过程用常数几何权重来达到. 这些信息可以在模拟计算之前的前处理阶段完成, 从而使其对极端复杂几何形状的计算更加简洁有效. 相比之下, 复杂几何形状的网格生成是以纳维-斯托克斯为基础的传统计算流体力学中一项繁琐的工作. 其次, 更重要的是它能处理更广泛的物理边界条件^[20]. 通常熟悉的无滑动条件可以解释为粒子壁反射的宏观极限, 然而在更广义的情况下, 滑动现象是自然存在的物理现象^[21], 这也给湍流的边界模式提供了新的实现途径, 即我们可以用适当的分子运动理论中的滑动过程来达到实现大涡湍流边界的目的. 本质上, 边界条件的核心任务是准确地确定基本物理量的流量, 如流体通过壁面的密度、动量和能量的流量, 而这些条件可以用适当的粒子反射过程准确实现. 由此而产生的动量流的法向分量自动对应于流体压力值, 而通常的依赖于流速本身和流场梯度线性函数的边界条件本质上是以牛顿流体为基础的, 即应力(stress)和应变(strain)必须成线性关系. 由于远离平衡态, 大涡流动的特性和有限努逊数流有许多相似之处, 其中包括非牛顿流体的非线性效应^[22]. 由此而引起的一个在更深刻学术层面的基本问题也成为值得探讨的课题, 即相对于纳维-斯托克斯为基础的大涡封闭模式方程, 广义定义下的分子运动理论是否是对大涡湍流物理更恰当的描述.

(iii) 以玻尔兹曼方程为基础的分子运动理论具有统计物理中熵的性质或遵守所谓的H-定理. 由于这一分子运动理论不只适用于线性稳定区间的分析, 因此它的存在给此类系统(如格子玻尔兹曼方程)稳定性方面提供更可靠的参数控制依据^[23]. H-定理是通常计算流体力学稳定性分析的普适方法, 但由于其不确定性而可能导致过于保守的参数选用或多次重复计算, 而相应于格子玻尔兹曼方程, 它的参数选用基本不依赖于特殊流体分布, 这对于计算模拟在复杂流体问题中的应用十分关键.

(iv) 较之通常的流体力学方程, 玻尔兹曼方程更贴近物理真实. 在解决了计算的复杂性之后, 从玻尔兹曼方程出发的算法容许对更广泛的物理机制进行更直接的模拟. 例如, 对多相流和非牛顿流体本构关系的模拟可以通过模拟形成这些宏观物理现象的微观机制来实现.

(v) 分子运动学方程形式和算法简单. 所有流体非线性本质都包含在局部的碰撞项中, 其对远离平衡态物理的描述可通过增加截断阶数, 而不是增加新的方程来实现.

应用格子玻尔兹曼方程直接计算流体力学问题的例子非常多, 在此我们特别提及一篇有关圆柱绕流的工作^[18]. 以下是其中的一张具有代表性的流线图与实验比较(图 1).

对于微流相关的问题, 我们选录以下有限努逊数模拟结果(图 2)^[13]. 从中可以看出, 高阶格子玻尔兹曼方程能够给出纳维-斯托克斯或低阶模式不能得到的, 如对努逊极小值的定量预测^[20,21], 在高努逊数下, 结果明显偏离纳维-斯托克斯方程.

格子玻尔兹曼方程的大涡模拟已广泛应用于实际工程计算. 由于流体对细小几何变化的敏感性以及流体各个部分的耦合效应, 严格地说, 用简化几何形状的途径来近似是不可靠的. 对于汽车或飞机的设计而言, 除了空气动力所造成的阻力系数、升力系数及力矩之外, 人们同时也关心其他多类问题, 例如, 物体的空气噪音. 许多车型或机型的性能指标差异在于它们产生的噪音大小, 而决定这些的重要指标的因素许多来自某些关键部位的几何形状, 例如对于曲率的处理可能导致流体的不同脱离现象, 从而导致气流的不稳定. 对于飞机而言, 在大攻角飞行状态下, 流体脱体问题更是至关重要. 另外, 计算流体力学对于车型进气口的优化设计也十分重要, 进气口的形状、位置和其他部件的相对布局都可能带来不同的流体效应, 这直接影响到其功率的大小以及散热效率. 风扇设计相关的功率和噪音性能也是计算流体应用的

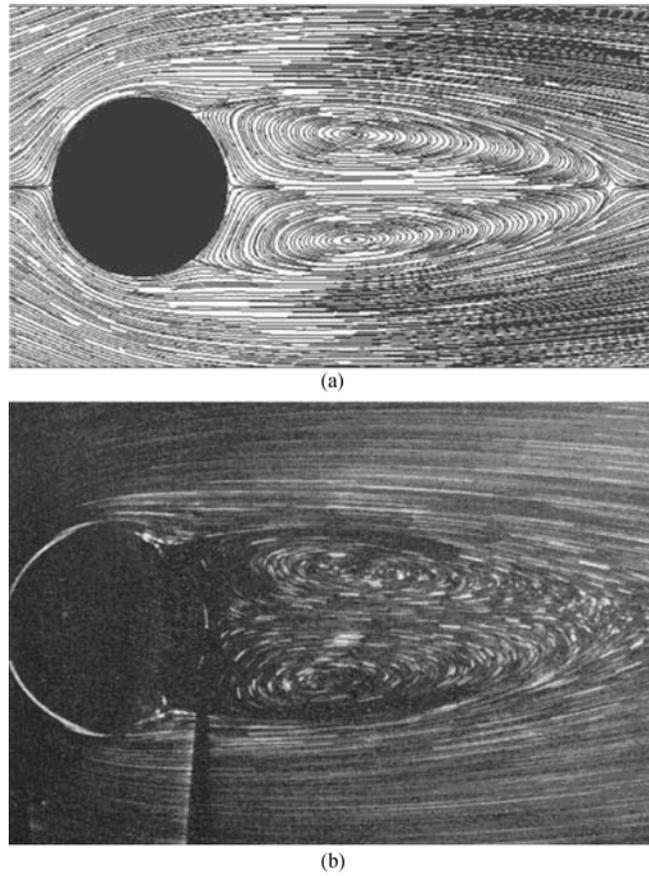


图 1 圆柱绕流^[18]

(a) 格子波尔兹曼计算的流线; (b) 实验获得的迹线

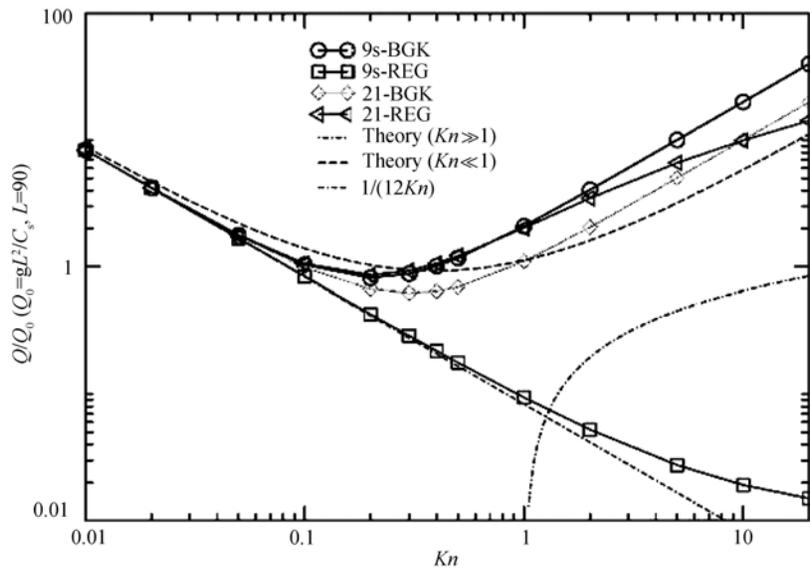


图 2 努逊伴谬: 微通道中流量随努逊数的变化^[13]

直线为纳维-斯托克斯方程的解析结果; 虚线为分子运动理论在极限情况下的结果; 符号为几种格子波尔兹曼模型给出的计算结果

一类重要课题. 与此相关的课题还包括螺旋桨和直升机的设计. 凡此种种, 不一而足.

对于所有此类课题, 直接风洞试验不仅费时费事而且对于某些关键因素或情况无法测量. 虽然现有的计算流体力学方法在准确性可靠性方面尚未达到完全取代实际实验的程度, 但它已成为一个极其重要的辅助手段, 能对流体在各种情况下的特性提供更全面详细的信息, 从而使人们取得对流体问题更理性的认识. 同时, 在实物未制造前的虚拟试验不仅节省时间和成本, 而且通过对多工况同时计算, 可以在更大的范围内对设计进行优化. 计算流体力学特别是格子玻尔兹曼方法在流体实际工程应用中有非常广阔的用武之地和发展空间.

图 3 是飞机某种特定攻角情况下表面压力的分布及流线(涡线)在空间的分布图.

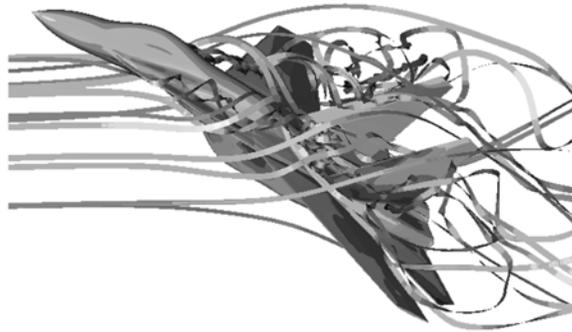


图 3 用基于格子玻尔兹曼方法的 CFD 软件 Power FLOW 计算得到的某飞机模型(CT1)在攻角为 30 度时的表面压力及流线(涡线)空间的分布图^[24]

图 4 是同一飞机模型由计算得到的升阻力及力矩系数及其与实验结果(文献[25])的比较, 用传统的纳维-斯托克斯方程(Fluent)攻角只计算到 50°, 图 4 中还绘有用欧拉方程计算的结果.

3 讨论

在此我们首先希望讨论一下发展计算流体力学科技软件的重要性和必要性. 软件工业的发展和普及是世界第三次工业革命(信息技术)的主要组成部分, 它空前地推动了社会进步. 软件工业的领先程度已成为衡量一个国家工业水平和竞争力的重要标志. 在中国, 各种以软件为主体的高科技工业已有相当发展, 科技软件的开发本身亦是高科技工业, 尽管一些国家在这方面处于领先地位, 但总体而言它还处在一个迅速发展的起步阶段, 因此, 抓住先机至关重要. 经验表明, 创造一个容纳软件创新, 特别是科技软件创新的环境, 不仅对科技软件本身持久健康的发展起着关键作用, 而且对带动整个学术领域的进步有着非常积极的作用. 研发科技软件与一般所谓的软件有本质的不同, 其主要特征在于它由多门尖端学科交叉形成. 它的关键成分包括先进的物理模式、优越的计算数学方法、最新软件工程合成和配套(如自动网格生成、并行计算负荷分配和前后处理, 等等)、对主流工业应用难题的深刻了解(如对现实空气动力现象的认识)乃至先进的管理及运作方式. 所有这些都需要各个学科紧密合作, 形成有机组合的梯队以适应这一系统工程. 在此我们仅想强调一下前后处理和用户界面的重要性. 举一个也许不甚恰当的比喻: 在视窗软件出现之前, 个人电脑还仅仅是极少数计算机专家手里的专用工具, 但在此之后所引发的个人电脑的普及不但带动了各个科技行业的飞跃, 同时也对社会各个领域甚至文化层面造成了巨大冲击, 因此, 友好的前后处理能力和用户界面是科技软件从计算程序专家手里的作品转化为工程技术人员手中有效工具的必要条件, 因为一个

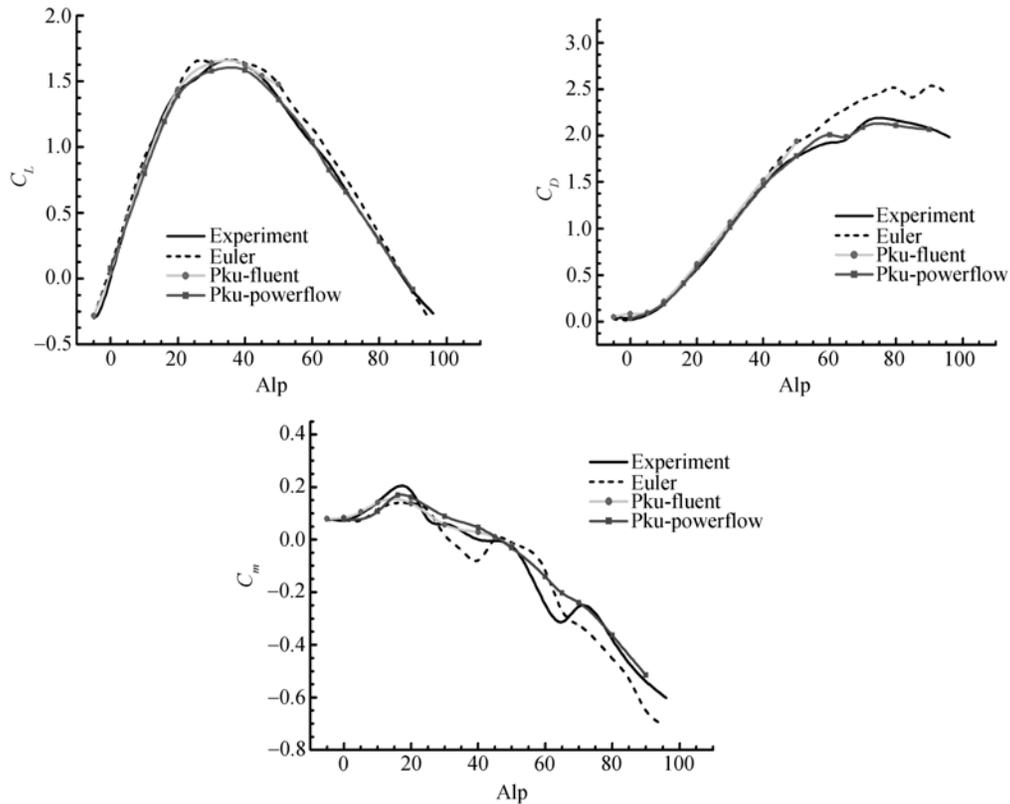


图4 同一飞机模型由计算得到的升阻力及力矩系数及其与实验结果(文献[25])的比较

资深的空气动力学工程人员不一定是一个计算数学或程序编制的专家,而科技软件开发中需要克服的中心困难在于科学研究与软件开发乃至实际应用的脱节.对于科学家来说,传统的科研方式是单科独立进行,如对各种湍流模式的研究在许多情况下是分散地行为,而相应的测试也往往只局限于少数流体类型的个别范例,即使是科学计算,程序也往往是由本学科学者自行编制,除了只能为少数人服务之外,它也一般不具备专业软件工程师所能达到的程序质量水平,更不用说它是否也考虑到普遍适用性和他用性.这里也有科学家不习惯于或无动力于科技转化为现实社会生产力的隐含因素.从另一个角度而言,具有软件开发和商业运作兴趣和专长的人员却往往不具备对物理和数学的深刻认识,因而有“心有余而力不足”之感.所有这些都是开发科技软件不同于一般软件的关键问题,因此,我们也认为前沿学科的真正交叉和有机结合本身是一门必须面对的重要学科.我们可以体会这样一个比喻:无论音乐家他个人的乐器演奏技艺如何高,他们分别演奏的效果是与他们共同演奏的有机合成的交响乐远不能相提并论的.

总之,计算流体力学存在极大的生命力和发展前景.现代的工程设计越来越趋向于利用计算机作为辅助工具(computer aided engineering, CAE),科技软件的研发和普及是高科技工业的发展方向,由于它的发展成熟而带来的对科技及工业领域的推动作用传统的研发手段和方式所无法比拟的.

最后我们来讨论一下与教学相关的问题:计算流体力学科技软件的普及也给教学提供了有效的工具.学生可以进入虚拟(virtual)实验室实施试验,从而建立对流体物理学特性的感

性和理性的认识. 科技和体育一样, 它的发展和提高是与它的普及紧密联系的, 用通俗的语言讲, 这正是所谓从少数人的“阳春白雪”到多数人的“下里巴人”带来的震撼. 计算机代替了人们很大一部分脑力劳动, 推广计算机应用的关键自然在于培养高层次的科技人才. 从教学角度来看, 就是要加速培养计算机科技应用方面的专家, 有普及才有提高. “钱学森技术科学思想指导清华大学工程力学研究班的创建”一文详细介绍了我国成功培养力学高层人才的一个革命性举措——“力学班”, 它正可作为弥补我国计算机应用差距所需人才培养方式的借鉴. 钱学森先生说得很具体: “到了 60 年代, 能进行快速计算的芯片电子计算机已出现, 引起了计算能力的一场革命. 到现在每秒能进行万亿次浮点的机器已出现. 随着力学计算能力的提高, 用力学理论解决设计问题成为主要途径, 而试验手段成为次要的了. 由此展望 21 世纪, 力学加电子计算机将成为工程新设计的主要手段, 就连工程型号研制也只用电子计算机加形象显示. 都是虚的, 不是实的, 所以称为“虚拟型号研制”(virtual prototyping), 最后就是实物生产了”. 钱学森先生当年提出的方向即是我们今天面临的时代任务.

参 考 文 献

- 1 Wilcox D. Turbulence Modeling for CFD. California: DCW Industries Inc, 1993
- 2 Chen H, Kandasamy S, Orszag S, et al. Extended boltzmann kinetic equation for turbulent flows. *Science*, 2003, 301—633
- 3 Frisch U, Hasslacher B, Pomeau Y. Lattice-gas automata for the Navier–Stokes equation. *Phys Rev*, 1986, 56: 1505
- 4 Wolfram S. Cellular automaton fluid I: Basic theory. *J Stat Phys*, 1986, 45: 471—526[DOI]
- 5 McNamara G R, Zanetti G. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata. *Phys Rev Lett*, 1988, 61: 2332
- 6 Chen S, Chen H, Martinez D, et al. Lattice Boltzmann model for simulation of magneto hydrodynamics. *Phys Rev*, 1991, 67: 3776
- 7 Chen H, Chen S, Matthaeus W H. Recovery of Navier–Stokes equations using a lattice- gas Boltzmann method. *Phys Rev A*, 1992, 45: R5339—R5342[DOI]
- 8 Qian Y H, d’Humières D, Lallemand P. Lattice BGK models for Navier–Stokes equation. *Europhys Lett*, 1992, 17: 479—484[DOI]
- 9 Bhatnagar P, Gross E, Krook M. A model for collision processes in gases I: Small amplitude processes in charged and neutral one-component system. *Phys Rev*, 1954, 94: 511—525
- 10 Grad H. On the kinetic theory of rarefied gases. *Commun Pure Appl Maths*, 1949, 2: 331
- 11 Shan X, He X. Discretization of the velocity space in solution of the Boltzmann equation. *Phys Rev*, 1998, 80: 65
- 12 Shan X, Yuan X F, Chen H. Kinetic theory representation of hydrodynamics: A way beyond the Navier-Stokes equation. *J Fluid Mech*, 2006, 550: 413
- 13 Zhang R, Shan X, Chen H. Efficient kinetic method for fluid simulation beyond the Navier-Stokes equation. *Phys Rev E*, 2006, 74: 046703
- 14 Shan X, Chen H. A general multiple-relaxation-time Boltzmann collision model. *Int J Mod Phys C*, 2007
- 15 Shan X, Chen H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Phys Rev E*, 1993, 47: 1815—1819[DOI]
- 16 Shan X, Chen H. Simulation of non-ideal gases and liquid–gas phase transitions by lattice Boltzmann equation. *Phys Rev E*, 1994, 49: 2941—2948[DOI]
- 17 Chen S, Doolen G. Lattice Boltzmann method for fluid flows. *Annu Rev Fluid Mech*, 1998, 30: 329—364[DOI]
- 18 Li Y, Shock R, Zhang R, et al. Numerical study of flow past an impulsively started cylinder by the lattice-Boltzmann method. *J Fluid Mech*, 2004, 519: 273
- 19 Chen H, Teixeira C, Molvig K. Realization of fluid boundary conditions via discrete Boltzmann dynamics. *Intl J Mod Phys C*, 1998, 9(8): 1281
- 20 Cercignani C. *Theory and Application of the Boltzmann Equation*. Scottish: Elsevier, 1975
- 21 Chen H, Orszag S, Staroselsky I. Macroscopic description of arbitrary Knudsen number flow using Boltzmann-BGK kinetic theory. *J Fluid Mech*, 2007, 574: 495
- 22 Chen H, Orszag S, Staroselsky I, et al. Expanded analogy between kinetic theory of fluids and turbulence. *J Fluid Mech*, 2004, 519: 307
- 23 Succi S, Karlin I, Chen H. Role of the H theorem in lattice Boltzmann hydrodynamic simulations. *Rev Mod Phys*, 2002, 74(4): 1203
- 24 Li X, Zhang X, Wang Y, et al. Lattice Boltzmann method used for the aircraft characteristics computation with high angle attack. *Acta Aerod Sinica*, 2007, 25
- 25 Wu J, Fan Z, He Z, et al. Research on the tests technology at high angles of attack in 2.4 m transonic wind tunnel. *Exp & Meas in Fluid Mech*, 2004, 18(4): 43