计算流体动力学的新趋势（II）

J. P. Boris
美国海军研究所计算物理与流体动力学研究室

3 新颖的算法

3.1 数值解的范围

要想使复杂流场的准确数值仿真成功，计算方面的处理方法应该是既强调对流体基本物理规律和力学规律的理解，也注意建立它们的准确模型。计算模型必须基于最少的一组过程和机理，人们认为这些模型能给出已知的分析解和观测结果的主要特点。对每一个主要过程的处理都应该设法使算法优化，以便使该过程能准确、灵活、可靠、有效地得到定性和定量的刻划。整个模型就是将这些优化了的各个算法恰当地组合而成。用这种办法构成的具体数值仿真如果已经受过分析解和认真的实验的考核，那就可以免去对唯象模型加一些根据不足的说明。由于重视基本过程和机理，这类仿真又可称作流体动力学“实验”。它的结果，优于靠一串宏观的粗略说法而拼凑起来的“杂烩”式模型所能给出的结果。

最难仿真的流动过程莫过于物理粘性不很强的情形下的流体运动，因而它总是计算流体动力学的前沿。为了克服这种主要困难而进行的研究使计算流体动力学成为广泛的领域。湍流、掺混和气体力学激波就是这些前沿的明显的实例。过去40年中一直在孜孜不倦地作大量研究以求只用有限个网格怎样使连续介质方程组的求解不断完善。描述流动曾用不同的表示法，每种表示法又构想了许多不同的算法。说明上述情况的文献有：Courant et al (1928)，von Neumann & Richtymyer (1950)，Godunov (1959)，Lax & Wendroff (1960, 1964)，Harlow (1964)，MacCormack (1971)，Potter (1973)，Roache (1982)，Gottlieb & Orszag (1977)，Anderson et al (1984)，Fritts et al (1985) 和 Oran & Boris (1987)。

计算机的容量和速度不可避免地总是有限的，因而就要求描述流动的表示法能够对于给定的固定的自由度数（例如网格点总数）使计算增加准确度，并且能处理更为一般和更为真实的物理系统。为了克服这些限制，算法中的新方向包括：高级的自适应网格，以便在复杂流场中在具有梯度处得到高的分辨率；对于复杂的流动几何形状，应用具有非结构网格的有限元法；对于Lagrange计算流体动力学与分子动力学，使用快速的紧邻算法；对于具有不等长时间尺度的物理过程的耦合模型，采用特别适当的软件。尽管在新的表示法和计算机结构方面有长远的光明前途，但在改进现有的 Euler 和 Lagrange 有限差分算法方面下功夫，却是一条风险小、收获大的途径。下面详细叙述三个有希望的新算法：在复杂运动区域用于计算流体动力学的有限元修正通量输运法（Finite-EleMent Flux-Corrected Transport，简称FEM-FCT）；对中等复杂几何形状的情况，用于求平滑流动准确解的谱-单元法；用于具

有多相运动界面的流动系统的自由 Lagrange 动力学算法。

3.2 最佳单调算法

仿真具有陡峭流体动力梯度的时间相关的复杂可压缩流动问题，例如湍流与非湍流之间的交界面、火焰或激波等问题，关键是应用保持正值性的非线性单调方法。这种类型的最初方法叫做修正通量输运法（参见 Boris 1971，Boris & Book 1976，Zalesak 1979）。其后与单调概念相结合的高准确度算法，有 van Leer（1979）的守恒定律的单调迎风格式法（MUSCL）和 Colella & Woodward（1984）的分段抛物线法（PPM）。近来，与许多总变量差递减（TVD）格式（例如 Harten 1983，Sweby 1984）紧密结合产生的斜率极限与通量计算概念已引入通量修正输运法、守恒定律的单调迎风格式法和分段抛物线法，这种一般类型的单调算法，不容许由于缺乏数值分辨以增加计算剖面而产生非物理的极大或极小。这些算法一般保持正值，因为象质量密度这种在原本意义上的正值量不可能变成没有物理意义的负值量。这些算法本质上也是非线性的。它们曾被广泛地应用于四边形有限差分网格，也能很容易地用于非正交网格。

通过几年来在单调对流算法方面下功夫取得的研究进展，可以适当地问，这种技术是否可以取得进一步的显著进展？对流算法还能得到多大的好处？显然，存在一个虽不理想却是最佳的解，因为用有限多个自由度数去无限准确地表示一般连续剖面是不可能的。这个最佳解依赖于所使用的最佳的定义，依赖于解所必须满足的条件。在陡峭梯度处不够高的分辨率会引起有限的误差。

一个由正 δ 函数（在某一元胞位置其值为 1，而在所有其他元胞位置其值为零）组成的流体剖面，是由许多正弦波组成的。Gibbs 现象迫使通过这个剖面构成的最光滑的连续函数发生振荡，这些振荡具有无物理意义的极值，甚至在特别元胞之间具有负值。有关这种插值连续剖面的一一对流（faithful convection），允许与有限分辨率有关的负值及虚假极值“出现”在若干时间步长中的网格上。为了避免这些不能接受的误差，对流算法必须将 δ 函数剖面予以扩展，使得在最相近离散表示法中的插值剖面在离散元胞值之间没有负值。这种将 Gibbs 现象的振荡予以展平的扩展，将使“最佳”的离散剖面具有相对于无限分辨率极限为有限的误差（见 Oran & Boris 1987）。

就对流而言，这个最佳解非常好，它比经典有限差分方法解连续介质方程通常要准确一个数量级。较好的非线性单调算法非常接近这个最佳解，通常完全在最小误差的 2 倍以内。因而，与应用基本上为 Euler 网格的流体流动仿真已经得到的好处相比，可能没有多大的改进。

接下来的一些显而易见的问题是：能否设计一种算法尽可能绕过这种看来不可避免的限制？其他的代价和问题是什么？下列 6 种方法有可能避免基于数值分辨率的这种准确度限制，实际上是一种不确定性原理：

①全部或部分忽略真实对流的正值性/单调性条件；

②应用弱不稳定算法来保持低分辨率的陡峭梯度；

③应用数值算法以外的特别的、对专门问题有效的信息去调整数值解；

④应用每个元胞增加自由度的 Euler 算法，例如在每个元胞中给定数值和斜率两个量；

⑤应用 Lagrange 算法变换掉对流误差；

⑥应用 Euler 算法附加 Lagrange 特性，例如增加自由度，去探索流体动力学界面、陡峭梯度区或不连续区的准确位置.

事实上，这些方法中的前两种经常被使用，但不能相信它们给出流体动力学方程的准确解. 第三种方法，当有关解的附加信息是有效的时候，是很有用的. 其余的回避分辨率带来准确度限制的每一方法，要求在数值表示法中增加一些自由度. 采用后三种方法中的哪一种方法，要视问题而定，并且需要折衷选择许多因子. 3.3—3.5节叙述这三种很有希望的算法.

3.3 自适应与非结构网格生成法

有限元方法用于解决结构工程中困难的实际问题已经多年了. 近来，有限元法已被改进用于各种各样的流体动力学与传热问题，最近并用于时间相关的流体动力学问题. Zienkiewicz & Morgan (1983) 的著作是应用有限元法求解偏微分方程方面很好的入门书. 三角形和四面体是二维和三维空间常用的有限元网格，因为它们可以用于描述不规则的物体或者具有奇特形状的内部边界和交界面. 将有限元法的基于三角形的非结构网格法与非线性单调有限体积法的准确性结合起来，产生一种又灵活又接近最佳准确度的单一算法.

有限元法的主要缺点是花钱太多. 它通常需要在每一时间步长求解线性矩阵问题，在每一时间步长反演大型矩阵要花的机时费用令人无法接受. 在多维的情形，有限元方法还需要很大的计算机存储，因为对每一变量重新计算几何形状和形状函数的费用同样也是无法接受的. 因而，在二维和更多在三维的情况，宁可将所需每一结点的好几十个量存储起来而不去重复计算它们.

将有限元法与有限体积法混合还有一些补充的优点. 在有若干因变量的情况，它们能相当直接了当地推广到多维问题. 这种方法对一系列不规则边界问题是非常合适的. 时间域也可以改变，以便需要时能够提高分辨率，或者考虑流动中的可变形结构.

求解时间相关流体动力学问题的两种新方法值得一提. 它们是活动有限元法 (moving finite-element method) (如 Miller & Miller 1981, Gelinas et al 1981, Djomehri et al 1988) 和 Löhner et al (1985, 1988) 发展的混合单调法. 这两种方法都是有限元法应用线性"展开 (tent)"函数的一个展开式，这些函数是多维的，或者能够被做成多维的. 然而，两种方法有根本的区别.

在活动有限元法中，结点位置被处理为动力学自由度. 这使结点位置的常微分方程与通常物理变量的积分方程结合起来. 这种方法对结点位置产生"最佳"值，还修正在结点处的变量. 然

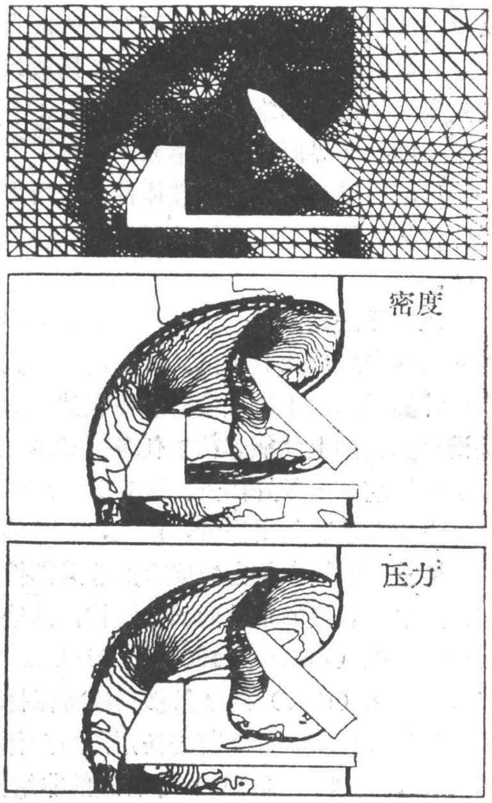

图 3 激波越过两个不规则形状障碍物的有限元通量修正输运法计算结果 (R. Lohner惠允使用图片)

而，有更多的变量包含在内且所得方程组是难解的，因此计算费用可能相当高，结点趋向于迁移到变量值急剧变化的区域．因而，这种方法可有效地解由推进的表面所表征的问题，因为结点数能减至最少，即使对每一结点需要作相当大量的计算．

有限元方法用于流体计算的历史，不如有限差分法和谱方法那么长．一般说来，每一有限元结点的运算次数大大超过有限差分或有限体积法中每一网格点的运算次数，因此，如果有限元法要有竞争力，它们必须有较高的准确度．Löhner et al (1985, 1988) 的算法将单调修正通量输运算法并入有限元框架，由于避免了矩阵的反演，因而它们与有限差分法相比是有竞争力的．图 3 给出了一个应用此法的典型解的例子，是激波越过不规则物体．在这种方法中网格也在时间上自适应，但只有动力学自由度是因变量的值．结点位置为静自由度，在推进的梯度与流动结构前面元胞被再次细分，而在其后面则根据演化系统梯度方面已知性质的规律重新使元胞变大．这些算法和自适应网格生成法把有限元法的灵活性同单调有限体积法的某些可靠性及准确性特点结合了起来．

这种方法的一个缺点是，当最需要存储的时候，每个网格点上需要的计算机存储量不够，严重溢出．然而，这种方法是准确的，相当快的，允许对复杂几何形状作非常灵活的网格生成．随着大型高速存储器计算机的发展，推广到三维情况正在变为现实．

3.4 谱单元方法

Patera (1984) 把设计来处理具有结构网格复杂几何形状的另一类算法称作谱单元法．谱单元法把有限元法处理几何形状的能力和谱方法准确性的潜力结合了起来．在谱单元法中，计算区域分成结点的一些小子区域以支持高阶多项式基函数．在每一谱单元中，对流体变量典型地用到二维的 5×5 个至 15×15 个结点．应用 Orszag (1980) 引进的方法，在这些单元的共同界面处将各单元“补缀”(patch) 在一起以覆盖住整个计算区域．因为在每一子区域内展开式函数是整体性的，所以在每一谱单元中可得到高阶的准确度．然而，这种局部化法受到各个子区域的限制．Canuto et al (1988) 从谱方法的前景出发评述了谱单元方法．

谱单元法提供了一个适当的折衷方案，兼顾应用空间网格的局部表示法和应用谱展开式的完全的去局部化表示法．该方法有在完全结构网格和完全非结构网格上的潜在有利条件，不过计算量趋向于比低阶有限体积法更大．由于谱单元能够给出剧烈的畸变，所以适当地联接谱单元实际上就能够构筑任务复杂的几何形状．Karniadakis et al (1986) 给出了此法用于不可压缩流的很好例子．正如 Korczak & Patera (1986) 所指出的，每个谱单元的畸变都是由等参数映射引进的，因此，当单元的畸变剧烈时，高阶近似原则上是可能的．

谱单元的缺点是它们固有的非局部性质，这种性质不正确改动传播着的激波前面的信息和作为单元联接的基础的固定结构．这些似乎不是根本的限制并可能将现有的方法加以推广而予以克服 (Zalesak 1981)．McDonald et al (1985) 和 McDonald (1988) 曾通过推广 Zalesak (1979) 的通量修正法将保持正值性对流方法推广到谱算法．可以推测，谱单元法的工作会象 Zalesak 首先使用的以整体基法的一样好．在同样意义上，象 Löhner (1987) 或 Jameson et al (1986) 等引进的非结构网格法，可能用来处理宏观谱单元的联接，而不必用象现有模型中各个三角形和四面体的联接．

3.5 自由 Lagrange 算法

通过在连续方程的解中消除数值扩散，Lagrange 算法看来提供了比 Euler 算法大得多的好处。Lagrange 参考标架随同局部流体速度一起运动，因而平流导数(advective derivative）被变换掉，剩下没有对流偏导数项的常微分方程组，这对数值计算是有吸引力的。因为没有对流导数，所以有限分辨率没有必要去光滑计算剖面（数值扩散）以保证质量密度和能量密度为正值。开始时在界面上的 Lagrange 网格的结点随同这个界面一起运动，因而 Lagrange 方法看来用于非均匀和多相流动问题也是理想的。

然而，这些潜在的好处并非不受限制。Lagrange 方法完全有伴之而来的其他问题。Lagrange 算法的传统应用是使用四边形网格，当仿真旋转流动时网格会迅速地畸变。例如，一个旋转着的涡旋使四边形 Lagrange 网格畸形变成一点，其中网格的线段互相交叉，不可能作出唯一确定的元胞体积。虽然网格再建能恢复成正常网格，但这需要不可避免的插值而又重新引起数值扩散。

为了解决结构 Lagrange 网格再建的有关问题，Crowley (1971)，Fritts & Boris (1979)，Trease (1985) 研究推出三角形和四面体网格重新联接推广到非结构 Lagrange 网格。这些方法要增加编程序的复杂性和较慢的计算速度，然而并不带来预期的准确度的提高。尽管在某些问题上得到良好的性能，但在重新联接网格时将显著的涨落引入仿真中，这在 Euler 法计算中是不出现的。在 Euler 表示法中，虽然急剧变化的流动特点在穿过一些元胞时不出现数值扩散，但是相对于网格的有限分辨率又会出现其他误差。

除去求解偏微分 Navier-Stokes 方程外，还有另外一些 Lagrange 型范 (paradigm) 用于仿真流体运动。前面讲到的研究流体动力学的格子气方法和分子动力学方法，就是以 Lagrange 基本原理为基础的。然而，求解 Lagrange 流体方程要回避统计涨落问题，后者困扰着用于计算流体动力学元胞自动机和分子动力学两种方法。因而，将研究目标对准较快的和较光滑的 Lagrange 算法是当前特别感兴趣的课题。Fritts et al (1985) 曾编辑一卷名为“自由 Lagrange 方法”的书，包含了很多当前工作的指南。然而，文献中相当缺乏用于困难的计算流体动力学问题的 Lagrange 解法。这清楚地表明，这个领域在与 Euler 方法进行广泛的竞争以前，还要走很长的路。

在 Lagrange 表示法中，自由度既用来确定 Lagrange 结点的位置，也用来确定这些结点位置上流体变量的值。这表明，当 Euler 方法的网格点位置在一维表格中能全部确定时，Lagrange 方法比 Euler 方法要增加计算费用；当 Euler 网格变成任意畸变网格或变成全部非结构网格时，Lagrange 算法没有什么额外的明显存储代价。然而，因为网格能够活动，所以 Lagrange 表示法中可能出现新型的不稳定性，而这在 Euler 表示法中是不能出现的。

没有基本的结点联接的方法，称为“自由”Lagrange 算法，这类方法现在正被小心翼翼地研究着以期望避开涨落，这些涨落是与随着 Lagrange 结点的紧邻网格的变化重新联接 Lagrange 网格的不连续过程相联系的。Fyfe et al (1987) 正在研究基于单调Lagrange 网格的多维算法以保持紧邻网格的轨迹。一般的想法是用所有邻近结点的信息去计算梯度和其他流体动力学驱动项，而不去确定不连续地变化的联接。一个结点对另一个结点的影响用一个加权值来描述，该加权值当两个结点分离时连续地变为零。因而，结点位置的无限小的改变并不能导致在该结点处任何影响流体动力性质的项发生有限的变化。

4 新颖的工具

4.1 当今的超级计算机结构

当今的超级计算机，例如Cray，ETA10，NEC，Fujitsu以及Hitachi，依靠矢量寄存器和流水线获得它们的计算速度。在运算流水线上，从存储器取出数据，每一个算术运算的几个阶段，计算结果存储到存储器（或矢量寄存器），循环附标（loop-index）的增加，以及为完成循环所作的试算，所有这些都是对于类似操作数的一个矢量的顺序分量同时完成的。因为矢量记号逻辑上很适合于描述这些运算，所以为了优化算法的过程，采用术语“矢量化”来获取这些计算机的全部优点。然而，在大多数超级计算机中，这个术语是用字错误，因为矢量的每一元素实际上是用下列这些硬件“流水线”按顺序计算的：存储控制器，线路（routers），算术处理机和逻辑处理机。即使带有矢量寄存器的超级计算机，在完成每一矢量元素的运算时也没有分开的处理机。矢量寄存器仅仅是用于存储操作数和结果的快速中间存储单元，借以保证通过流水线的最佳顺序处理。

常规的标量计算机的速度一般是每秒百万个指令（MIPS）。这反映了这类计算机的标量性质。作为科学的计算，更合理的测度是每秒百万浮点运算即每秒兆浮点运算（megaflops）。当今最快的超级计算机达到的水平可超过每秒千兆浮点运算即每秒10^9浮点运算（gigaflops）。每一浮点运算需要5或6个指令，因此在每秒百万个指令和每秒百万个浮点运算之间有一个对应的因子。指令数方面的因子5或6转换成执行速度方面时因子10或20，因为在超级计算机存储器中采用假定的操作数据计算机规则可能会增加费用。尽管如此，当代超级计算机仍然是以顺序计算机为基本运算方法。

下述事实并不令人惊奇：这些顺序流水线计算机结构已达到提高计算速度既困难又代价太高的发展阶段。在这些计算机中，硬件正推向单处理机速度的物理限度。然而，用它们求解实际的三维问题，对于大多数流体力学家来说仍然显得太小太慢。

在过去几年里，已经出现了几种不同的超级计算机结构。用下列几种方法对这些计算机从技术上进行了分类：(a) 按最大浮点运算速度每秒兆浮点或每秒千兆浮点分类；(b) 按可用的处理机数目分类（即按可能的“晶粒度（grain）”或并行程度分类）；(c) 按单个处理机的功率分类；(d) 按通信和存储策略互相联接处理机分类；(e) 按程序坐标和程序控制方法分类。在本综述中，我们对计算流体动力学问题考虑5种类型的结构。

①超级计算机　它们是现有最高级的、有广泛用途的快速计算机，计算速度为每秒1千兆浮点运算以上，包括CARY X-MP，CARY 2，Fujitsu，Hitachi，NEC，ETA 10等系统。如前所述，它们有矢量运算能力，由运算流水线执行并有某些并行性。一般来说，并行性程度不是很高，一般有2至4个处理机，通常称做“粗晶粒的（coarse-grained）”计算机。

②超小型计算机　这些计算机有每秒10至100兆浮点运算的速度和某种程度不高的并行处理能力，通常有比真正的超级计算机更紧密的耦合系统。但是，它们是用不同程度的标准方法设计的。与真正的超级计算机相比，它们以其便宜的价格和较高的经济效益占领了部分市场。这些超小型计算机包括：CDC CYBER，Convex C1和C2，SCS 40，Multiflow，Alliant，Elexi等。其性能比得上带有较好软件和人机对话计算机系统的现有阵列处理机。这些系统中的并行性也是很粗糙的。

③高度并行处理机　这些机器应用更基本的结构设计特别是应用并行性，有每秒50兆至

2500 兆浮点运算数．在最近的将来，它们一般是可进一步发展的并有希望同普通超级计算机竞争，虽然在某个时刻未到以前也许不是多用途的机器．这些高度并行处理机包括：TMC 联接机，蝶式 BBN 机，Navier-Stokes 计算机（Princeton），各种超立方体计算机如 NCUBE 和 AMATEK 系统，收缩阵列（systolic array）．对于这类超级计算机，其并行性的晶粒通常被描述为"中等的"（表示量级为16至 128 个处理机）或"精良的"（表示并行性程度很高，具有 256 个或更多个处理机）．

④混合系统　它们是上述几种机器的组合．例子之一是图形与阵列处理系统（GAPS），该机是我们海军研究所计算物理与流体动力学研究室组装的，下面简要予以说明．这台机器是由多个计算元件形成的复杂组装物，具有全部超级计算范围的性能（目前开始启用的约为每秒 200 兆浮点运算）．它与任何一个高度并行机构不同的地方在于，对所有类型的计算流体动力学问题都将是适用的．例如，结构网格与非结构网格具有很不相同的计算约束，正如用于计算流体动力学模型的隐式和显式时间推进策略那样．一个带有大约 64000 个处理机的联接机，可能象装有 Cary 的阵列处理机一样有效．在 Cary 计算机上可能有效地完成的流体动力学计算，正如联接机的每一结点去同时积分 Cary 机中描述每一流体元素化学性状的常微分方程组．在最近的将来，装有光学网络部件的复杂组元超级计算机系统，将使整个系统变得非常灵活，只要用于这种分布式计算的网络控制元件变得易于使用就行．

⑤特殊用途计算机　正如 4.3 节将要进一步讨论的，现在存在着研制特殊用途高度并行计算发动机（special-purpose highly parallel computational engines）的机会，即在终端应用不要求通用性的情况下，容许当今以软件来完成的许多机构用小芯片级的硬件来完成．数据通信和控制条件事先已知，所以不需要通用性．军用信号处理系统是这类并行处理超级计算机中的第一个实用的成员，但是10多年来，专用的 Navier-Stokes 计算机和致力于计算流动的设备，已经成为讨论和设计工作的主题．

4.2　用于计算流体动力学的并行处理

并行计算，这个用了大约10年时间的研究课题，今天已是商业现实．相互联接的多阵列处理机的混合系统，方便用户的标量处理机，以及高带宽的数据传送装置方面的其他外围设备，都可以组装成现役的设备．超立方体网络已从极少数相当弱的结点扩展到高达1024个结点的相当紧密的耦合系统，每个超立方体网络都能保障每秒10—20兆浮点运算流水线的浮点处理机．更精良的晶粒并行系统显示出对专门问题具有象图象处理和元胞自动机那样的特殊性能（例如 Hillis 1987）．在上节曾说明的 5 类"超级计算机"，其中两类即超级计算机和超小型计算机不需要进一步讨论．在本节及下一节，将对后三类各举一个例子予以讨论，其中并行性的利用是真正有助于获得期望性能的手段．

一个主要的技术变化，例如并行处理作为计算流体动力学界进行工作的方法时引起的变化，趋向于放弃在程序、方法学和软件等通用设备方面已作的巨额投资，因为这些设备不能容易地适应新的并行计算结构．高度并行结构不仅允许作矢量化，而且还允许作紧密耦合的与松散耦合的并行计算．这种计算机的使用，迫使我们必须发展对于这种计算机为最佳的流体状态表示法，迫使我们必须重新考虑如何为其编写算法和软件．幸运的是，计算流体动力学是非常"可并行化"的学科，因而也期待在算法和软件方面有重大的进展．确实，目前正在探索并行处理能够在计算流体动力学的许多应用中发挥作用的途径．

自然界是以完全并行的方式“解决”流体问题的，所以最有效的计算流体动力学表示法与算法，看来是那些再现自然界的所作所为到很有效程度的表示法和算法．于是，用于并行处理的最佳的新数值算法，以及将老式数值算法改造成并行形式，都在变成对于计算流体动力学和分子动力学是适用的．虽然由于构造有效的并行工具方面的困难可能使当前流行的某些方法蒙上阴影，但是更适于并行处理方向的其他模型将担当起它们的任务．

Waterman（1988）建议区分基于下述方法的并行系统：计算的单元交互传递控制信息和数据．通过一条共用的数据总线使处理机之间通信表示着普通小型计算机结构的自然延伸．这种通信方法的优点是简单和熟悉．对于有限的通信带宽的缺点是有争议的．由于在数据总线上装有好些个处理单元，所以当允许有些单元互相通信，有些与很多控制处理机通信，有些与共用存储器通信的时候，另外一些单元就一定闲置在那儿坐等数据，这很象单独一根电话线联接着许多办公室．

图形与阵列处理系统（GAPS），是为了计算流体动力学、分子动力学、化学反应流动而组装的混合超级计算机系统的一个例子．它由市场上可以买到的硬件和一些分离的阵列处理机组成，这些阵列处理机具有分级并行的性能，各个处理机具有强有力的矢量化能力（参见 Clementi et al 1985，Boris 1986b，Boris & Oran 1988）．图形与阵列处理系统的能力并不象真正的超级计算机那么强大（快速和多用途能力），但能保证直接作图与进行仿真的交互进行．

图形与阵列处理系统是一个异步的、多重任务的分布控制系统，由带有 12 兆字节辅助快速存储器以及大约 3 千兆字节磁盘存储器联接到 VAX 11/780 的 APTEC 2400 输入/输出计算机组成．图形与阵列处理机系统装有几个重要的计算元件，包括 6 个 Numerix MARS 432 阵列处理机（每个最高性能为每秒30兆浮点运算）．这 6 个阵列处理机用 Fortran 语言编制程序并有一个矢量化程序库和同步软件． 3 个高分辨率彩色作图监控器——一个 Tectronix 4128 光栅系统，一个 Iris 四维矢量系统，一个 Metheus Ω 3600——接入图形与阵列处理系统．当图形与阵列处理系统仿真的结果用高带宽图形程序包计算出时，这计算结果就能显示出来．此图形程序包则从 VAX，从图形与阵列处理系统的阵列处理机，或者从 CARY 计算机选取数据．

多处理机研究的一个重要部分已发展出有效的算法，这些算法能采取异步多用途并行结构如图形与阵列处理系统等的优点．流体动力学用修正通量输运算法建模，设计时采取了比现有超级计算机中使用的流水线和矢量寄存结构更多的并行性优点．在图形与阵列处理系统这一现有工具上，化学反应流动模型能在相当高的分辨率下进行几天或几周计算时间的流体仿真，因为它是在不影响主机正常交互作用的背景下运行的．当所有 6 个阵列处理机都对相同的问题进行工作时，Cary XMP 处理机可以发挥 80% 的性能，而输入 Aptec 通信总线的则小于50%．

对于有限的通信带宽，象这种系统的性能却受制于许多日益增加的快速处理机之间的竞争．更多的通信通道是解决这些问题的方法．对于数量不大的处理机来说，联接每一处理单元与另外的处理单元的联线使用纵横开关是可能的．用这个办法有两个问题：第一，联接处理机联线的数目必须与处理机数目的平方成正比．第二，重要的通信重担现在落到每一个处理机上，现在必须同时调度并巧妙处理 N 个通信联线．纵横制方法在适应光学通信方面似乎

比电子传递数据好些，因为光子能互相通过而电子却不能．于是，纵横制通信似乎不能加强目前最强有力的有用并行处理机的基础．

已设计出另一些处理机间的通信方法，把每个处理机引出线路的数目减少到容易操纵的数目．超立方体结构（例如参见 Fox & Otto 1984，Seitz 1985，Gustafson et al 1988）有 $\log_2 N$ 条联线通往每一处理机，用每一字位地址的一条联线给处理机编号．一种看法认为是把处理机布置在一个长的线性阵列中．在超立方体中，每一处理机与其相邻的一个处理机相连，再与下一个紧邻的相连，与 4 个远处的相连，与 8 个更远处的相连，如此等等，以 2 的幂次直到与 $N/2$ 个更远处的处理机相连．每根联线联接一个处理机与另外一个处理机，处理机的地址用二进制表示，$\log_2 N$ 个位置的每一个只差一个字位．任意两个处理机之间的数据通信，是在超立方体中沿着通信联线而数据包从一个结点移向另一结点时通过一系列“转移”实现的．在超立方体中，每次转移时数据包改变源结点地址的一个二进制字位，一直到终点地址的相应字位．因此，如果源地址与终点地址相差是 $\log_2 N$ 字位的 5 个，则需作 5 次转移，这里 $\log_2 N$ 是为 N 个处理机结点的每个结点编号所必需的字位数．

因为每一个结点要对付所有这样一些数据包，这些数据包在旅途中通过该结点走向它们的分离终点地址．所以从任意一个处理机移动到另一个处理机的数据包之间出现碰撞．这些数据包的碰撞，以及需要分辨这些碰撞的继电器，是要把联线数目从 N^2 减小到 $N\log_2 N$ 而付出的代价．这种碰撞问题在计算流体动力学中不象在人工智能应用和其他形式的一般信息处理中那么重要，因为被仿真的流体的物理性质可借助于自然结构传递信息，这可以用来减少或者消除数据包的碰撞．Gustafson et al (1988) 报道了在结构分析、波动力学、流体动力学中使用1024个结点的超立方体的广泛研究．他们选择修正通量输运流体动力学算法求解可压缩剪切流问题作为试验情况，并能将相邻处理机之间数据通信的费用减少到低于总处理时间的百分之几．这种对并行处理有效的通信将可能用于很多计算流体动力学算法．

4.3 混合元胞自动计算机

混合元胞自动机是普通元胞自动机模型的推广，其中控制规律是完全局部的，并且可以同时应用于系统的给定状态所确定的所有结点去求得下一个状态，但在这里它们是对浮点数规定的局部数据起作用．在这个意义上，具有空间局部模板和足够通用校正公式组的显式有限差分或有限体积模型是一种混合元胞自动机．用公认的具有准确确定的连续宏观流体量系统作为混合元胞自动机，就可以消去元胞自动机模型中一般不能接受的尺度为 $N^{1/2}$ 的统计涨落，这里 N 是宏观范围内一个小体积中格子气原子的数目．进而，对于范围广泛的系统将“法则”与所期望的物理性质并联起来就比较容易了，从而能对可压缩流体作准确的仿真．

现在，区分经典元胞自动机模型及其混合形式没有什么困难，因为有限精密度的浮点数是离散的．而且，更复杂的元胞自动机模型（例如在三维的情形）为确定系统的状态，在每一格子位置已需要很多数据字位．还可以把这些区别看成为是否选择对真实物理涨落进行平均，不管数字计算时对问题离散前和离散后是如何表示的．正如 2.2 节所指出的，很可能找到具有精密的很少字位的最佳表示法．

有许多计算流体动力学算法的例子已经满足形成混合元胞自动机模型的准则，其中包括某些非常一般且灵活的单调对流算法．这些算法完全是局部的，并且对所有元胞使用完全相同的指令．对于这些模型，可能建造出一种计算机，在这种计算机中，三维计算元胞的普通

立方体数据块可能以任意尺寸或外形堆成象“Lincoln Logs”或“Lego”那样．在谱单元的意义上，元胞初始输入数据或许能确定畸变的几何形状，每一数据块的边界条件可以从记载着各种允许情况的目录单里挑选一个．一般的几何形状可能用立方体数据块结构来表示，内部障碍物可能用没有运算功能的数据块来代替某些数据块而完成使命，或者用一些特殊用途的数据块表示不同的物质或流体．从一个数据块到下一个数据块的数据通信，可能通过相邻数据块的接触面耦合起来．电能可能用传导棒传递，传导棒沿坐标方向之一穿越组合体．限制这种专门用途计算机大小的物理现象是热传导，因为对于混合元胞自动机，算法和通信是完全局部性的．随着线性尺寸因而空间分辨率增加1倍，热生成率将增至8倍，而辐射面积只增至4倍．

5 计算流体动力学的新颖应用

5.1 关于较复杂问题的仿真

计算流体动力学方法的应用现在是，将来也总是受制于可用计算机的速度和大小．第3节讨论过，复杂几何形状同复杂物理现象一样引起很多问题．时下的计算流体动力学方法，或者可以仿真几何形状复杂而物理性质简单的流动，或者可以仿真物理性质复杂而几何形状相对简单的流动，但不能仿真几何形状及物理性质都复杂的流动．因而，研究工作继续在广阔的前沿进行，以便研制出更快、更可靠、更灵活、更易使用、更精确的算法．随着问题中现象数目的增加，这些现象之间相互作用的可能的数目，至少是按现象数目的平方增加．进行准确的仿真时，对这些可能相互作用的每一个，我们将不得不从数值上加以表示并进行分辨．在实践中，每一相互作用都将有它自己的参数范围，在该参数范围内的数值计算预测将是有效的，而超出该范围则这些预测将是有疑问的．因此，复杂流体系统中可能相互作用的数目的迅速增加，是薄弱环节的潜在来源．

计算流体动力学中公认的主要的薄弱环节，是湍流和化学反应流动的详细的表示和仿真．这两种流动对计算流体动力学都特别重要，因为它们都是流体本身固有的性质，而不是外部强加的（如边界条件或受力项）或者只在极端区域（例如交界面）出现的．在多维计算流体动力学模型中，分辨小尺度的湍流或完全的化学动理学（kinetics）系统，迫使我们投入无法接受的经费，如果那是完全能够作的话．在每种情况中，仔细处理湍流（或化学反应）时所需的自由度远远超过在问题表示法中实际分辨（它们所需）的自由度．尽管如此，计算流体动力学恐怕仍是用得最多和最有用的计算学科，因为它是如此之自然而然地填补了分析和实验所能完成的工作之间的大空白．作为一门本质上是宏观的学科，计算流体动力学很好地配合了设计和改进真实世界流体系统的需要．

5.2 唯象理论在计算流体动力学仿真中的应用

对付分辨率极限和总仿真费用的一种方法，是将昂贵的处理过程分离出来并用简化的唯象模型代替它们．这些唯象理论是物理上合理的近似模型，其中的参数是推测的，拟合实验结果的，或者是根据更详细但更受限制的数值模型校正过的．例如，一个符合实际的化学反应机理包含很多化学组元以及或许有联系它们的几百个化学反应率．为了在多维计算流体动力学程序中计算各个化学组元和流体温度而去费劲地积分常微分方程组，理论上是可能的，但实践上是极端昂贵的．另一种方法是用详细的化学反应机理去计算整体性能，例如最终温度和压力等作为初始温度和压力的函数．这种宏观结果的表格，成为计算流体动力学模型中

使用的、计算费用低廉的唯象理论依据．一般说来，用于这些唯象理论的基本框架越准确，所需宏观结果的表格就越少，模型的有效范围就越宽．

始终存在的一个趋势是过高估计唯象理论实际上能够预测多少．当控制过程不能在时间上与空间上进行准确分辨时，或者控制过程没有包括在计算模型中时，就不可能真正预测物理上的相互作用．如果在仿真中各控制物理过程或各控制流体动力学过程中的一个过程是用唯象模型来处理，则完整的仿真不会比唯象理论结果更准确．甚至其他一些影响用更详细的模型处理时，这一结论也可能是对的，因为就分辨全部空间与时间尺度对问题的影响来说，唯象模型并没有真正地取代这种影响．

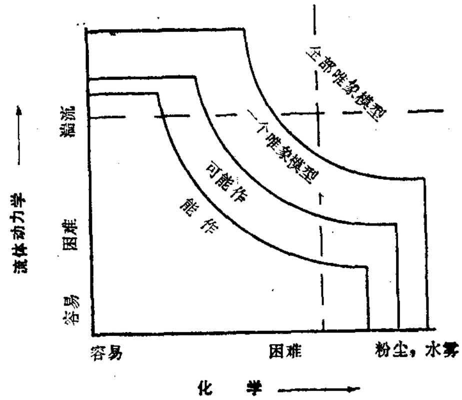

图 4　唯象模型与复杂系统的计算流体动力学仿真详细模型的相互影响

图 4 示意地说明了，复杂的多维湍流系统和化学反应系统的详细计算流体动力学仿真实际上达到了什么水平．图中把困难看作是二“维”的：沿水平轴是化学动理学的复杂物理性质和局部多相物质影响，在铅直轴上是流体动力学的与几何形状相关的分辨界限过程和湍流，每条轴线给出从**容易**到**困难**的难度范围．

在水平轴上，容易的问题可能包括几个组元间的若干耦合化学反应．困难的问题包括几十个组元之间的数百个化学反应．更为困难的问题，例如粉尘、水雾、液滴等的多相性质以及其他非均匀流体动力学现象，在铅直虚线的右面表示出．后边这些过程和相互作用，几乎总是需要一种唯象表示法来把它们包含到实际的计算流体动力学仿真中．

沿着铅直轴，容易的流体动力学问题可能包括一维激波计算．困难的问题包括暂态的（transient）多维流体动力学，其中有流场的散度和旋度分量两者的相互影响．湍流的详细建模是极端困难的流体动力学问题．一般来说，用唯象理论来表示湍流的宏观流体影响．这些情况用水平虚线上方铅直坐标轴高处的位置表示．

图中表示**能作**的区域包含的问题，既有容易的流体动力学部分也有容易的化学反应部分．计算工作可集中在问题比较困难的方面．眼下，对于只具有某一方面困难的某些问题而言，只要问题的其他各方面足够容易，复杂流体动力学过程的详细建模是可能的．**可能作**的区域是**能作**的区域的延伸．如果有充分强有力的计算手段可供利用，并且计算能直接回答少量非常集中的特殊问题，**可能作**的区域里的问题就能够仿真了．这不需要什么新的技术，但与**能作**的计算需要 1 至 4 小时相比，这里需要10至40个超级计算机机时．

新的超级计算机系统主要针对**可能作**的问题．在目前的超级计算机上数百计算小时的工作，在新的系统上用几个计算小时就能够完成，而这些新系统又可能是昼夜不停地运行的．这种运行时间的减少，使得目前**可能作**的问题最终将成为**能作**的问题．计算流体动力学计算有一个趋势是，在一个满载的计算机系统上把计算机时缩减为几个小时．大型复杂计算机的一个晚上的计算时间，完全抵得过计算流体动力学专业人员全神贯注和理解那些偶然发生的错误并相应地修改他的程序的能力．另外，10良好协调的 4 个小时的运行所得到的信息的科学价值，往往超过单机40个小时的运行所得到的信息的价值．

下一个区域标明**一个唯象模型**，它表示总问题的困难大得不能同时进行全部重要物理性质和流体动力学性质的充分的分辨．至少有一个主要方面不得不用唯象理论处理．图4中最外面的区域标明了**全部唯象模型**．在这个区域，问题的流体动力学性质和其他物理学性质的困难大得对二者的哪一方面详细求解都认为是办不到的．因此，必须建立相互作用的一些唯象理论．请注意，如果一个唯象理论是一个可疑的表示法，则两个唯象理论之间的相互作用至少加倍地可疑．守恒定律虽然有助于保持某些方面的仿真的总体正确性，但是不能期望能对那些新问题作详细的预测，有化学反应的湍流流动模型就属于这个范畴．

应用局部唯象理论如状态方程或化学动理学模型等，有一个胜过流体动力学唯象理论的优点．原则上我们知道，如何将从前的过程与大涡仿真相结合．对于实际的化学反应或化学组元，即使我们不完全知道必须输入的化学反应率或比热，我们对那些方程也有某些把握知道如何将它们拟合到整个计算流体动力学模型中并驾驭这些模型．在湍流中，关于知道些什么情况以及如何应用这些知识，模型建立者处在不利得多的地位．在守恒方程中已包含湍流的影响，但在详细的仿真中，由于各种限制和经费问题，延误了分辨所有活跃的空间尺度影响的可能性．这个问题已由提出的唯象理论处理，例如 k-ε 模型和涡扩散模型并在这些模型中使常数同实验及其他计算拟合．与状态方程和化学反应唯象理论有关的困难是，湍流在感兴趣的宏观尺度范围内实际上不是一个局部现象．所有空间与时间尺度均在湍流中受到激发，因此不存在一个自然尺度能在其上从复杂的但是可以计算的大尺度流动中辨识湍流．

随着计算机硬件和软件的改善变得更为有用，我们期望看到图4会有某些变化．第一，三维大型仿真将成为容易作的日常工作．第二，每一维空间尺度包括更大的范围也成为可能．当相互作用的拟序结构（coherent structures）和若干尺度能够方便地分辨时，如何去表示更小和未分辨的尺度，其细节将变得无足轻重了．

5.3 计算流体动力学中人工智能技术的应用

科学计算、信号处理和计算机科学这些传统上分离的学科，随着每一方面达到相对成熟和方便用户的水平，它们正在一起成长并互相加强、在计算流体动力学中当前趋向并行处理的趋势，廉价的流水线和矢量处理机利用率的日益增加，都是信号处理方面得到巨大进展的直接结果．前面叙述的图形与阵列处理系统，Cornell 超级计算机中心的强有力处理机，IBM并行处理机系统(例如 Rapaport & Clementi 1986)，都是由信号处理系统直接变成在科学应用上的通用系统．

计算机科学正在对计算流体动力学作出相当大的贡献．显著的项目是：编译程序，人-机对话操作系统，网络以及文件处理设备．其他贡献正开始产生重大影响．对于计算流体动力学，随着人机对话的作图工作站变为标准的人-机联系装置，计算机科学的人机“运行工程学”（human engineering）技术必然会担当起日益增加的任务，这就是加速综合由进行仿真产生的巨量原始数据的能力．随着流体动力学发现其手段日益进入实时系统（例如预测现场竞赛帆船的性能或者预测在湍流条件下试图着陆的飞机上发展中流动的力的性能），迅速吸收计算流体动力学计算结果的必要性变得更加迫切．

人工智能（AI）研究，这个长期来计算科学的一个奥秘部分，也正在达到成熟的程度和能提供足以对计算流体动力学作出重要贡献的批量生产的水平．随着问题和计算机系统变得更为复杂，关于专家系统和自动编程系统的现实需要正在兴起，这是为了有组织有系统地

发展大型仿真模型，为了指导各个计算机运行的分析与解释，为了建立来自存储仿真结果的庞大数据库。Andrews（1988）概括如下：“第一个人工智能／计算流体动力学系统表明，现在的人工智能技术能够成功地应用于良好提法的问题，这些问题可借助于分类法或者枚举的选择法解出（与设计相反，这里的解必须是合成的）。将仍在研究范围的人工智能课题结合到或将人工智能技术应用到缺乏了解或没有定型的计算流体动力学工作，这种尝试有某些好处，但是一般地导致旷日持久的研制时间，并且是大量投资又无收益保障的项目。”

5.4 实验流体动力学中的计算

实验室实验和现场观测，在很长时期内曾经是研究流体动力学行为的主要方法。由于最近在诊断、记录和数据处理技术等方面大踏步地前进，所以尽管有几十年来的研究，对这种主要方法的了解仍继续在迅速增长。在过去的20年里激光和计算机技术的迅速发展，使得非常局部化，高精度的有效无损探测技术的出现，一般地成为可能，并已成为加强这些探测技术最新进步的基础。

用于流体动力学实验的下述两种性质不同的方法值得注意：整体流动显示与局部的定量测量。流动显示仍然是了解流体系统整体动力学行为的最好方法。目前激光器常用于照射选定的流动平面和流动区域，用于激发特别的染料并诊断化学反应。影片和录象带是广泛使用的记录手段，在可读型计算机中， 带有电荷耦合器件阵列（CCDs）的直接记录或特殊录象记录的设备，正在日益用来直接获取流场显示的信息。

流动的定量分析可以在某些困难的条件下完成：先将若干连续的图象数字化，应用现代图象处理技术区分流动中几个时刻相应的位置和结构，然后从画面到画面的变化推算它们的动力学行为。

第二类实验方法包括用探头取得就地流体的定量测量值。象在流场显示中一样，激光器与计算机技术结合在一起，用激光Doppler测速仪（LDV）测量局部质点速度。激光器也常用来测量混合流组元迹线的局部密度，从而测量混合的时间历程。

计算机技术的最近发展正趋向于将流场显示与点探头诊断之间的区别搞得模糊不清。应用设计来从记录到的连续画面获得流动中关于某些特殊位置的定量信息的若干技术，可以把来自实验的这些流场显示结果进行数字编码和脱机分析。应用计算机可以准确地并自动地计算例如两种成分不同流体之间被动界面等的位置或运动特征，或者计算例如火焰锋面或激波之类的动力学表面。特殊照明标志的运动可以从连续的画面推算出来，只要给出局部流体速度和密度二者的信息，假定这些标志质点或气泡都小得可以将浮力和惯性的影响忽略不计。这种数字记录也使得计算流体动力学仿真与实验之间的直接比较变得容易。

计算机技术通过高速数字化和应用精益求精的作图法，也正在为流场的局部定量测量转换成流场显示创造条件。当流体中有足够多的点能取得并记录到数据且有足够高的重复率时，计算机能够内插测点之间的流动性质，为以后重新构造象流体速度、涡量或流动Mach数这类“不可见的”其他场的“显示”创造条件。在流体动力学研究中采用的计算流体动力学-超级计算机技术的这些相当新的实验室应用，必将成为计算流体动力学的一个迅速发展的部分。

参 考 文 献（78篇，略）

张德华译自：*Ann. Rev. Fluid Mech.*，**21**（1989）：345—385.

（**董务民**校）