

一类迎风紧致差分格式全离散特性分析*

王 强 傅德薰 马延文

(中国科学院力学研究所,非线性连续介质力学开放研究实验室,北京 100080)

摘 要 采用 Fourier 分析方法,通过显式多步 Runge-Kutta 时间离散一维线性对流方程,导出了一类高精度迎风紧致格式全离散色散关系式。详细分析了不同 CFL 数下所研究差分格式的耗散、色散及相应的相速度、群速度等特性。以数值实验显示了格式较高的计算精度和分辨率。

关键词 迎风紧致格式 Fourier 分析 色散关系 群速度

中图分类号 O 35

0 引言

对湍流和气动声场等一类在时间和空间上具有多尺度特征的流动现象的直接数值模拟,要求选取的数值方法对所关心的流动尺度能够适当地表达。因此,在非正常多尺度流动问题的直接数值模拟过程中,除去影响数值稳定性的格式耗散误差以外,与小尺度波动相速度和群速度等密切相关的格式色散误差对数值解的影响同样不能忽视,进行该方面的深入分析研究是有必要的。

同传统的差分格式相比,紧致格式在流动小尺度量的分辨能力上因更接近谱方法而具有明显的优势,应用范围也更广泛,如高阶导数逼近、高精度插值和滤波等^[1]。为了计及流动中波的传播特性,抑制数值解中的非物理高频振荡分量,文[2,3]通过流动控制方程对流通量的正负分裂,先后提出了一类高精度迎风紧致格式,在半离散情形下完成了算法的耗散、色散及各向异性等行为分析,并用其对大范围的物理问题进行了数值模拟^[4]。本文采用 Fourier 分析方法,以显式多步 Runge-Kutta 算法作为时间离散算法给出 Fu 和 Ma 的迎风紧致格式一个全离散特性分析结果。

1 数值模型

考虑如下一维线性模型方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (1)$$

其中相速度 c 是大于 0 的常数。设 L 为计算区域长度,并被等分成 N 段,网格间距 $\Delta x = L/N$,则式(1)的空间半离散差分近似为

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_j + \frac{F_j}{\Delta x} = 0 \quad (2)$$

收稿日期:1998-06-04

* 国家自然科学基金资助课题

王强 男 31 工程师 北京 7201 信箱 16 分箱 100074

式中 F_j 为 j 点处一阶导数差分近似。由文[2],对空间一阶导数,一类迎风紧致格式可写作

$${}_l F_{j+1} = \frac{1}{l} (a_l^+ \bar{x} + b_l^-) u_{j+1} \tag{3}$$

这里 l, a_l 和 b_l 是精度参数,上标 $+, -$ 分别表示空间一阶前差和一阶后差,式(3)中最常用的两个迎风紧致格式为(对 $\Delta x > 0$ 情况)

$$\text{UCD3: } \frac{2}{3} F_j + \frac{1}{3} F_{j-1} = \frac{5}{6} \bar{x} u_j + \frac{1}{6} \bar{x}^+ u_j \tag{4a}$$

$$\text{UCD5: } \frac{3}{5} F_j + \frac{2}{5} F_{j-1} = \frac{1}{60} (-\bar{x} u_{j+2} + 11 \bar{x} u_{j+1} + 47 \bar{x} u_j + 3 \bar{x} u_{j-1}) \tag{4b}$$

它们分别具有 3 阶和 5 阶空间精度。本文主要以这两种格式为代表加以分析。

记 $R(u)$ 为式(1)中对流项的空间迎风紧致差分离散,于是式(2)的 m 级 Runge-Kutta 时间推进全离散形式为

$$u^l = u^n + \Delta t \sum_{s=1}^l {}_l R(u^{s-1}) \quad (l = 1, \dots, m) \tag{5}$$

这里 $R(u^{s-1})$ 对应 n 至 $n+1$ 时间层内的中间步 $t^n = t^0, t^1, \dots, t^{m-1}, t^m = t^{n+1}$ 上的 $R(u)$ 值, ${}_l R$ 是确定时间精度的非齐次项加权平均系数。

2 Fourier 分析

2.1 全离散 Fourier 变换

假设 $u(x, t)$ 是区间 $(-\infty, +\infty)$ 上以 L 为周期的周期函数。全离散情形下,计算区域内共包含 N 个离散 Fourier 谐波分量,形为

$$\hat{u}^n(k, \Delta t) \exp(ikj), \quad (k = -N/2, \dots, N/2) \tag{6}$$

其中 \hat{u}^n 是离散 Fourier 变换系数。无量纲波数 $k = 2\pi k/N$, 无量纲频率 $\omega = 2\pi t/\Delta t$, 是圆频率。易知 $k \in [-N/2, N/2]$, 且因 $u_j^n \in \mathbb{R}^1$ 得 \hat{u}^n 关于 $k=0$ 复共轭对称,故以下仅在 $(0, N/2]$ 波数空间上基于式(6)对式(5)进行 Fourier 分析。

以 F 表示离散 Fourier 变换,由 Fourier 变换微分性质不难证明

$$F[\Delta t R(u^l)] = Z \cdot F(u^l) \tag{7}$$

其中函数 Z 只依赖于空间差分算子,与 l 无关。又经归纳推知 $F(u^l)$ 有 $\hat{u}^l(k, \Delta t) \exp(ikj)$ 形式,于是记 $g^l = \hat{u}^l(k, \Delta t) / \hat{u}^n(k, \Delta t)$, 导出式(5)对应的谐波放大因子一般形式($l = n+1$)

$$g^{n+1} = 1 + \sum_{s=1}^m {}_m Z g^{s-1} \tag{8}$$

另一方面, m 阶 Runge-Kutta 算法(记作 RK m)的系数满足如下 m 阶 Taylor 展开

$$u^{n+1} = \sum_{s=0}^m \frac{1}{s!} \left(\frac{\partial^s u}{\partial t^s} \right)^n \Delta t^s + O(\Delta t^{m+1})$$

将模型方程(1)代入上式右端并进行离散 Fourier 变换,得放大因子另一形式

$$g^{n+1} = 1 + \sum_{s=1}^m \frac{1}{s!} Z^s \tag{9}$$

它是 m 级 Runge-Kutta 算法为 m 阶的必要条件(非充分条件),且此时式(8)和式(9)等价。因 Z 只与空间差分算子有关,若以 k 表示空间半离散差分数值修正无量纲波数,由(7)可知 Z

$= (-Ci)k$, 其中 CFL 数 $C = \tau / \Delta x$, 进而推出对格式(4) 分别有

$$Z^{(3)} = (-C) \cdot \left\{ \begin{array}{l} \frac{2 - 2\cos(k) + 3\sin(k)i}{2 + \cos(k) - \sin(k)i} \end{array} \right\}$$

$$Z^{(5)} = (-C) \cdot \left\{ \begin{array}{l} \frac{18 - 16\cos(k) - 2\cos(2k) + [28\sin(k) + \sin(2k)]i}{18 + 12\cos(k) - 12\sin(k)i} \end{array} \right\}$$

2.2 特性分析

对简正 Fourier 模态, 令 $u^n = \hat{u} \exp[i(-r^n)]$, 易知 $\hat{u} = i \ln(g^{n+1})$, 则数值离散波数可表示为

$$f(k) = (\hat{u}_r + i \hat{u}_i) / C$$

对流方程(1) 确定的是一个无耗散无色散系统, 所有波数的波均以同一相速度传播, 其振幅既不增长, 也不衰减, 且系统内载能波包的传播群速度与单波的相速度相同, 与其不同的是数值离散则通常形成一个带耗散的色散系统。以下就差分格式(4) 加以讨论。CFL 数取为 $C = 0, 0.2, 0.4, 0.6$, 其中 $C=0$ 对应半离散情形(在相关图中以粗线标示)。无量纲波数 k 以归一化。

(a) 数值耗散和数值色散

函数 $f(k)$ 的虚部 f_i 对应数值耗散。当 $f_i = 0$ 时, 数值解是稳定的。图 1 是以 RK3 时间离散, 由 UCD5 得到的 f_i 曲线。时间离散对格式耗散特性中的低频部分几乎没影响。但对高频部分影响显著。低 CFL 数下, 全离散保持了对高频部分的耗散滤波作用, 其 f_i 值同半离散 f_i 值接近并略为偏大, 这有利于高频波衰减, 使其滤去, 抑制由高波数量引起的数值混淆误差, 并使调控 CFL 数, 提高计算精度成为可能。对称紧致格式即使在全离散条件下对高频量也基本无耗散, 需要特殊滤波技术, 这也是迎风格式近年在湍流直接数值模拟中得以发展的原因之一。随 CFL 数增大, f_i 曲线在高波数段出现波动, 耗散量减小, 最后失稳。分析显示, 格式(4) 的稳定性限制约在 $C=0.4$ 左右。为检验常用于中心格式的人工粘性滤波技术对格式(4) 的影响, 与图 1 对应, 图 2 是施加 6 阶人工粘性 $AD_6 = \epsilon^{(6)} (\partial^2)^3 u_j$ 后求得的 f_i 曲线 ($\epsilon^{(6)} = 0.015$)。同样, 人工粘性的影响也主要作用于高波数范围, 而且增大了低 CFL 数 f_i 值 ($C=0.2$)。对 f_i 曲线存在波动的情形, 人工粘性使之更加不稳定。

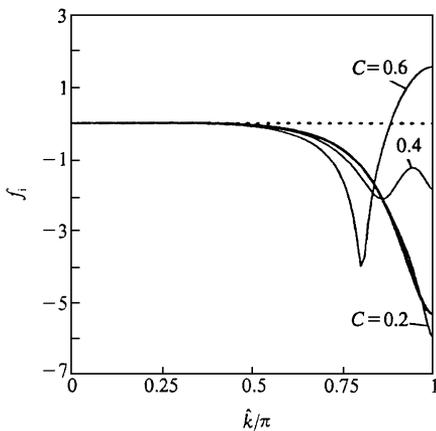


图 1 UCD5-RK3 耗散曲线

Fig. 1 dissipation error

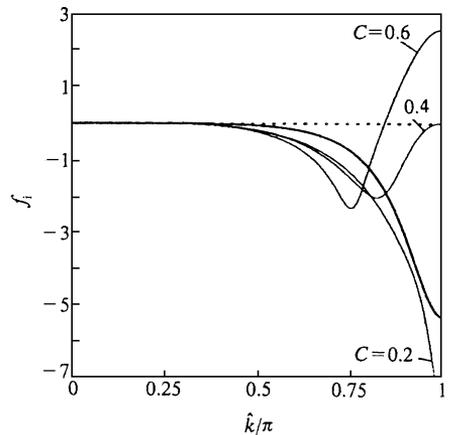


图 2 附加人工粘性耗散曲线

Fig. 2 dissipation error with artificial viscosity

函数 $f(k)$ 的实部 f_r 对应数值色散。图 3 是 RK4 时间离散, 由 UCD5 得到的 f_r 曲线。时间离散对色散的影响依然集中于高波数范围, 低 CFL 数时, 全离散 f_r 值同半离散情形相差不大, 高 CFL 数时, 高波数 f_r 显著偏离 45 度直线, 这对应耗散 f_i 曲线波动和不稳定情形。

对稳定的 CFL 数范围, 提高时间精度时, 函数 $f(k)$ 趋于半离散 $f(k)$ 值, 即格式本身的耗散和色散特性是全离散相应性质的内在决定因素, 并可以此改善数值稳定性及高波数物理尺度分辨率。

(b) 相速度和群速度

相速度是不同波数行波的传播速度。离散情形下, 数值相速度取作

$$\tilde{c}_1 = C \cdot$$

这里数值相速度误差系数 $C = f_r(k)/k$ 。C 通常不为常数 1, 对应一个色散系统, 即不同波数的波在其中以不同的相速度传播, 因此, 相速度分析是研究数值格式色散误差特征的另一条途径。图 4 是对应图 3 的 C 曲线, 时间离散对低波数相速度影响较弱, 对高波数相速度的影响因 CFL 数而异。当 CFL 数超过某一临界值时, 高频数值波相速度明显大于实际相速度。提高时间精度可减小这种误差, 并使之趋近于空间半离散情形下对应的数值波相速度。对多维问题, 将式 (1) 中的 x 轴旋至任意方向, 其在所有波数下所对应的相速度仍为常数, 而相应差分格式的相速度误差则表现为各向异性。若以 α 表示旋转角, 有二维数值相速度公式^[1]

$$\tilde{c}_2 = \frac{\cos \alpha f_r(k \cos \alpha) + \sin \alpha f_r(k \sin \alpha)}{k}$$

图 5 是格式 (4) 经相速度等值线表现出的各向异性, 周向是 α 角, 径向是波数 k , 原点 $k = 0$ 。可以看出, 相速度误差在低波数不明显, 基本是各向同性的。在高波数区域, 沿斜向相速度误差最小, 沿纵横方向相速度误差最大, 格式 UCD5 的等值线更集中于高波数区域, 故其相速度各向异性误差好于格式 UCD3。

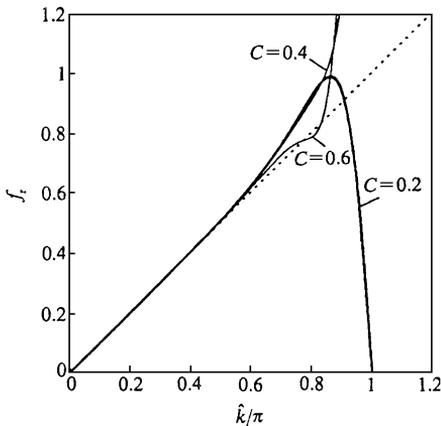


图 3 UCD5-RK3 色散曲线
Fig. 3 dispersion error

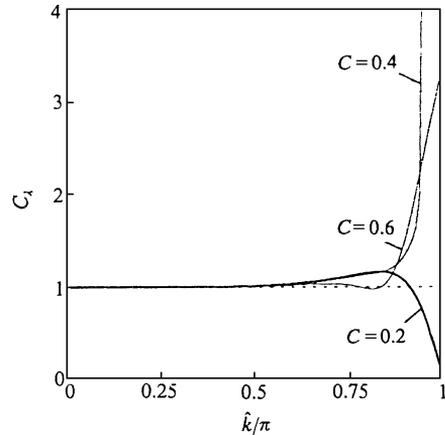


图 4 UCD5-RK3 相速度曲线
Fig. 4 phase velocity

对于色散系统, 能量以群速度传播, 它也是波包的传播速度。离散数值群速度取作

$$\tilde{V} = C_v \cdot$$

这里数值群速度误差系数 $C_V = \partial f_r(\kappa) / \partial \kappa$ 。同样,一般 $C_V \neq 1$,即离散系统波能的传播依赖于波数。图 6 是对应图 4 的 C_V 曲线,类似于相速度分析,时间离散对低波数群速度也无影响,而对高波数影响明显。当 κ 足够大时,低 CFL 数 C_V 均小于 1,且小于 0 的伪数值波范围增大;高 CFL 数 C_V 均大于 1。由 $C=0.4$ 曲线可以看到 C_V 在所有波数均大于 1,由文[4],这是快型格式特征,但半离散条件下原格式是混合型的($C=0$ 实线),说明即使保持数值算法不变,未经滤去的某些高波数的数值波相对该波数下实际物理波的运动方向在不同 CFL 数下也会发生改变。

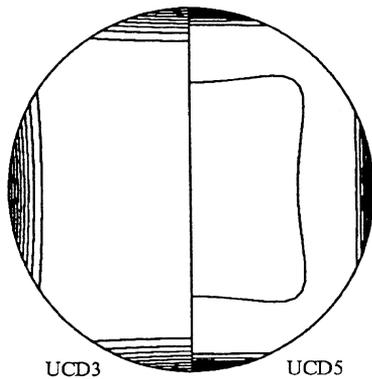


图 5 相速度各向异性等值线

Fig. 5 anisotropic contours of phase velocity

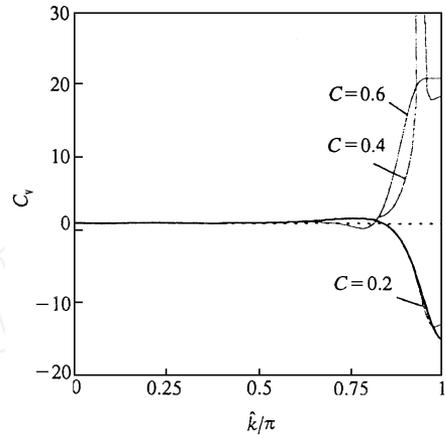


图 6 UC D5-RK3 群速度曲线

Fig. 6 group velocity

(c) 特征值分析

从(4)式中任意选取一个格式在所有网格点上联立,然后将方程(1)代入得到的方程组中,并考虑简正 Fourier 变换模态 $u = \hat{u} \exp[i(-t)]$,可得实系数广义特征值问题

$$(\hat{u}_i) A U = B U$$

其中 A, B 是 $N \times N$ 稀疏实矩阵, U 是关于元素 \hat{u}_j 的一维向量,特征值 $\lambda = \omega_i / \omega$ 。取周期边界条件,采用双精度隐式单位移 QZ 复矩阵广义特征值算法,对不同 N 的计算显示,格式(4)均满足稳定性限制。图 7 是 $N = 200$ 时对 UC D5 得到的特征值谱。该谱具有贝形结构,并位于虚轴右侧(稳定谱),关于实轴对称。该谱的形态和大小不依赖于 N ,仅和格式相关。随着 N 的增大,新增的特征值沿贝形结构向两端加密,其中实部最大的特征值渐近于格式半离散情形下波数 ω 的耗散绝对值(文[1]的研究认为对部分对称紧致格式该渐近值也位于谱中,且仅和格式相关)。数据分析显示,该谱还有两个同样与 N 无关的特征值 0 和 1,后者孤立地

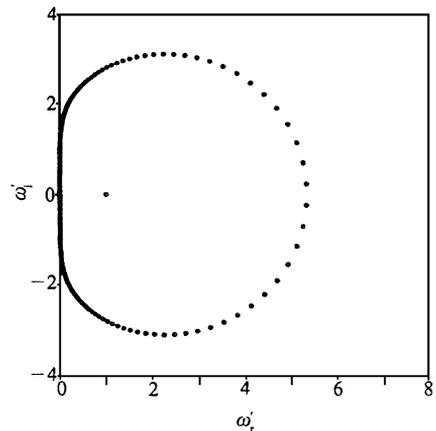


图 7 UC D5 格式特征值谱

Fig. 7 eigenvalue spectrum

存在于贝形结构之内。据文[1],对称紧致格式没有类似特性的特征值,而0特征值只有部分对称紧致格式才包括。

3 数值实验

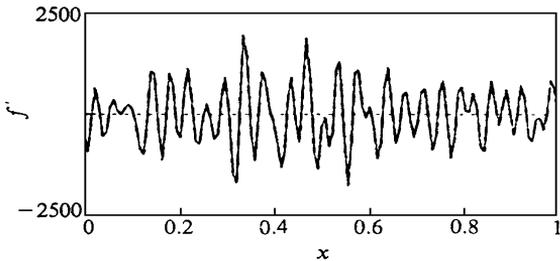


图 8 检验函数导数计算对比

Fig. 8 derivative of Fourier function

导数 f' (虚线) 和解析值 (实线) 的对比,二者十分吻合,表明相应格式具有较高的计算精度和分辨率。

现给出时间发展二维可压平面混合层涡的卷起直接数值模拟算例。控制方程是可压 Navier-Stokes 方程。计算条件是对流 Mach 数 $Mc = 0.6$, Reynolds 数 $Re = 400$, 网格点数 64×81 。初场解析设定,同时迭加该计算条件下对应的二维线性最不稳定粘性扰动波^[5]。时间方向以显式 3 阶 Runge-Kutta 算法推进。取 $t = 21$,且使等值线数值的分布一致,从图 9 绘出的 5 阶迎风紧致格式 UCD5 同 6 阶对称紧致格式 SCD6 计算所得到的被动质量分数等值线的对比可以看出,前者流场结构清晰而光滑,后者因受网格分辨率的限制而存在明显的非物理波动,在剪切层交界处附近,这种差异更加明显。可见,高阶迎风紧致格式的高波数耗散特性可以有效地抑制数值离散的混淆误差,从而显出良好的计算稳定性和准确性,适于复杂流动问题的求解。

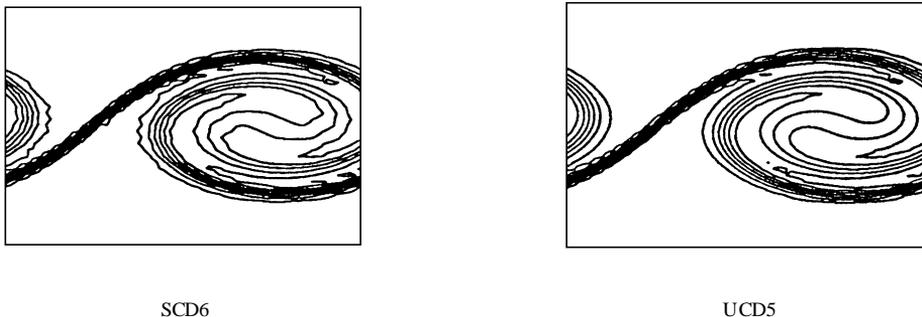


图 9 被动质量分数等值线对比

Fig. 9 passive scalar contours

为了模拟格式 (4) 对多尺度问题的计算精度,考虑波数区间 $[0, k_m]$ 上的连续 Fourier 模态,取检验函数

$$f(x) = \operatorname{Re} \left\{ \sum_{k=-k_m}^{k_m} f(k) \exp \left[i \left(\frac{2kx}{L} + \phi_k \right) \right] \right\}, \quad x \in [0, 1]$$

求解域被分作 128 段,两端设周期边界条件,并令振幅 $f(k) = 1$,相 ϕ_k 在区间 $[0, 2\pi]$ 上均匀随机分布。图 8 是格式 UCD5 求得的一阶

参考文献

- 1 Lele S K. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *J Comput Phys*, 1992, 103:16~42.
- 2 Fu D X, Ma Y W. High resolution schemes. *Computational Fluid Dynamics Review*, 1995, 234~250.
- 3 Fu D X, Ma Y W. Efficiency and accuracy of numerical methods for solving the aerodynamic equations. *Proceedings of the 5th International Symposium on CFD*, Nagoya, 1989.
- 4 马延文,傅德薰.高精度差分格式及多尺度流场特性的数值模拟. *空气动力学学报*, 1998, 16(1):24~35.
- 5 王强,傅德薰,马延文.可压缩平面混合层稳定性数值计算. *计算物理*, 1997, 14(4~5):413~416.

BEHAVIOR ANALYSIS OF UPWIND COMPACT DIFFERENCE SCHEMES FOR THE FULLY-DISCRETIZED CONVECTION EQUATION

Wang Qiang Fu Dexun Ma Yanwen

(LNM, Institute of Mechanics, Academia Sinica, Beijing 100080)

ABSTRACT Based on the Fourier analysis method, a fully-discretized dispersion relation is derived for a family of high-accuracy upwind compact difference schemes by considering one-dimensional linear convection equation temporally discretized by the explicit multi-step Runge-Kutta algorithm. The effects of CFL numbers on the characteristics of these schemes, including dissipation and dispersion errors, phase velocity and group velocity, are analyzed. The two-dimensional anisotropy problem is discussed. Moreover, an eigenvalue analysis is performed. Two numerical examples are used to show the high accuracy and resolution of these schemes.

KEY WORDS upwind compact difference scheme; Fourier analysis; dispersion relation; group velocity.