

摄动有限差分方法研究进展*

高 智

中国科学院力学研究所 LHD 实验室, 北京 100080

摘 要 摄动有限差分 (PFD) 方法, 既离散微商项也离散非微商项 (包括微商系数), 在微商用直接差分近似的前提下提高差分格式的精度和分辨率. PFD 方法包括局部线性化微分方程的摄动精确数值解 (PENS) 方法和摄动数值解 (PNS) 方法以及考虑非线性近似的摄动高精度差分 (PHD) 方法. 论述了这些方法的基本思想、具体技巧、若干方程 (对流扩散方程、对流扩散反应方程、双曲方程、抛物方程和 KdV 方程) 的 PENS、PNS 和 PHD 格式, 它们的性质及数值实验. 并与有关的数值方法作了必要的比较. 最后提出值得进一步研究的一些课题.

关键词 有限差分方法, 摄动精确数值解方法, 摄动高精度差分方法, 摄动有限差分方法

1 引 言

有限差分方法是获得微分方程数值解的一种有效方法. 在差分法中微商用差商来近似, 为了使差分近似更好地逼近微分方程的精确解, 人们对差商近似作了持续的有效选择和改进. 微商最常用的差分近似是直接差分, 包括中心差分、向前和向后差分以及它们的组合差分近似. 对于流体力学计算, 二阶中心差分格式会产生数值振荡, 向前和向后差分格式可充分反映对流迎风效应, 但精度只有一阶, 难以满足复杂流动计算的要求. 为此人们提出了许多有效的高精度、高分辨率差分格式, 主要的如对称和迎风多基点差分方法 (或格式)^[1~4], 该法使用比直接差分基点数更多的基点, 例如一阶微商的多基点差分为

$$\left(\frac{df}{dx}\right)_i = \sum_{k=-k_1}^{k_2} \alpha_{i+k} f_{i+k} \quad (k_1, k_2 \geq 0, \quad k_1 + k_2 > 3) \quad (1.1)$$

其中 f_{i+k} 表示 f 在 $x = x_{i+k}$ 处取值. 因而差分精度得以提高, 精度提得越高, 使用基点数越多. 另一类多基点差分格式是在求解双曲型方程中发展起来的 TVD, ENO, WENO, NND 和 UENO 等一大批彼此类似的十分有效的方法 (格式)^[5~12]. 这类差分格式在解的间断处具有高的分辨率或称压缩性, 但无需增添人工粘性, 基本上也不发生振荡, 而在解的光滑区具有高精度, 因此可称为差分自适应方法 (格式). 多基点会给边界点和靠近边界点的处理带来麻烦, 同时也使系数矩阵带宽加宽, 因而加大了计算量. 改进多基点方法的一个有效途径是对称和迎风紧致差分方法^[11~16], 紧致法与多基点法相比, 突出优点是达到同样高的精度使用较少的基点,

收稿日期: 1999-03-11, 修回日期: 1999-11-05

* 国家自然科学基金项目、中国科学院“九五”基础性研究重大项目、中国科学院力学研究所所长基金择优项目、中国科学院力学研究所 LHD 实验室项目资助.

但紧致格式还需数值求解新增加的“紧致”关系，紧致关系把多个基点上的函数值和导数函数值关联在一起。例如一阶微商的紧致差分表达式为

$$\sum_{k=-k_1^{(1)}}^{k_2^{(1)}} \alpha_k^1 F_{i+k} = \sum_{k=-k_1^{(0)}}^{k_2^{(0)}} \alpha_k^0 f_{i+k} \quad (1.2)$$

其中 $F_{i+k} = \left(\frac{df}{dx}\right)_{i+k}$ ，表示 f_{i+k} 和 F_{i+k} 在 $x = x_{i+k}$ 处取值。因此紧致格式的适用范围难以确定，结构较为复杂，运算量亦有明显增加。广义紧致差分方法^[17,18]是紧致差分方法的一种发展，该法把待求微分方程足够高地求导，然后求解诸网格节点上的待求函数值及其导数函数值。所有上述方法的共同点是：通过选择或改进微商的差商近似，保证差分近似更好地逼近微分方程的真解。

此外，又如一致逼近高精度差分格式^[19]，该法把方程在离散区间 (x_j, x_{j+1}) 的解及导数表示为一簇线性无关函数（例如 Chebyshev 多项式）及其导数的线性组合，区间两端的函数值及导数与区间中点的值相关联。精确数值解格式^[20,21]和有限分析 (FA) 方法^[22~26]更进一歩，它们在离散单元上求得局部线性化方程（对流扩散方程和不可压缩 NS 方程组）的精确数值解，再把诸离散单元的精确数值解综合在一起获得全域流场的数值解。因此它们的解并非只在有限离散点上且在网格内也满足待求解的微分方程，精确数值解方法其实已超出了有限差分方法的范畴^[25,26]。精确数值解格式和有限分析格式^[26~29]理论上比较理想，它们的提出也较早，但由于比较复杂，且存在指数计算“溢出”的问题，没有得到更大发展。

2 物理分析

当把流动物理问题提炼为数学模型，即导出运动微分方程时，关于体积元上的平衡关系和取极限过程等的物理考虑和数学处理都有特定的内容。微分方程的有限差分离散应与微分方程的推导运算存在合理的关联，我们从这个角度对上节所述高精度、高分辨率差分方法作一定的物理分析，为的是更好说明 PFD 方法的基本思想。显然上节有的方法对任何微分方程都适用而与待求解的具体方程本身并无直接关系，例如一阶微商的多基点和紧致差分关系 (1.1) 式和 (1.2) 式就是这样。有的方法超出了推导运动微分方程时的物理考虑和数学处理，多基点差分方法就是这样，例如一维对流扩散方程的四阶（五基点）和三阶（四基点）迎风差分格式^[1~3,27]

$$u\varphi' = \varphi'' \quad (2.1)$$

$$\begin{aligned} \left(2 + \frac{\alpha}{2}u_i\Delta x\right)\varphi_i &= \frac{1-\alpha}{12}u_i\Delta x\varphi_{i+2} + \left(1 - \frac{2-\alpha}{3}u_i\Delta x\right)\varphi_{i+1} + \\ &\quad \left(1 + \frac{2+\alpha}{3}u_i\Delta x\right)\varphi_{i-1} - \frac{1+\alpha}{12}u_i\Delta x\varphi_{i-2} \end{aligned} \quad (2.2)$$

其中 $\alpha = \text{sign } u_i$ 。由格式 (2.2) 推知，上下游基点 ($i \mp 1$) 物理量对中心基点物理量 φ_i 的贡献均与流动的物理过程相符。而上下游较远基点 ($i \mp 2$) 物理量对中心基点物理量 φ_i 的贡献则与相邻基点 ($i \mp 1$) 物理量的贡献符号相反。TVD, ENO 和 WENO 这一类差分格式也有类似的情况，不是上游就是下游，相邻基点的通量贡献具有相反的符号。紧致差分使用较少的基点数，但使用 ($i \mp 1$) 点的导数值实际上隐含了使用 ($i \mp 2$) 基点的函数值，因此从物理角度来看，紧致格式本质上仍是一种多基点差分格式，例如对一阶空间导数采用紧致差分离散时，三阶精度紧致格式（内点）为^[14]

$$(1 - \delta)\varphi'_{i-1} + 4\varphi'_i + (1 + \delta)\varphi'_{i+1} = \frac{3}{\Delta x}(\varphi_{i+1} - \varphi_{i-1}) + \frac{2\delta}{\Delta x}(\varphi_{i+1} - 2\varphi_i + \varphi_{i-1}) \quad (2.3)$$

其中 δ 为耗散参数, 紧致格式 (2.3) 等价于以下格式

$$6\delta\varphi_i = (1 - \delta)\varphi_{i-2} - (1 + \delta)\varphi_{i+2} + (2 + 4\delta)\varphi_{i+1} - (2 - 4\delta)\varphi_{i-1} \quad (2.4)$$

由 (2.4) 式推知, 必有一方不是上游就是下游, 相邻基点 ($i \mp 1$) 物理量对 φ_i 的贡献与较远基点 ($i \mp 2$) 物理量对 φ_i 的贡献呈现相反符号. 产生这类问题的主要原因是: 不论使用更多的基点 (多基点格式) 还是既使用函数值又使用导数函数值 (紧致格式), 它们与导出对流扩散方程 (2.1) 的原始推导相比均增添了新的物理内容和数学处理. 所有上述高精度、高分辨率格式在数学上无疑是正确的, 上游或下游相邻基点的通量贡献符号相反是非物理的通量修正, 难以找到物理依据. 对流扩散方程的直接差分近似, 即二阶中心差分格式和一阶迎风差分格式则不存在多基点格式 (2.2) 和紧致格式 (2.3) 的上述问题. 摄动有限差分 (PFD) 方法 [27~39] 把微分方程差分离散的概念加以扩充, 既离散微商项也离散非微商项 (包括微商系数), 目的是在不超出推导微分方程时的物理考虑和数学处理, 即维持微商用直接差分近似的前提下, 提高差分格式的精度和分辨率.

3 摄动精确数值解 (PENS) 方法 [28~32]

离散单元局部线化方程的摄动精确数值解 (PENS) 方法的基本思想 [28,29] 是: 微商用直接差分近似, 在维持直接差分结构形式和基点数不变的前提下, 利用微分方程本身的固有关系, 即利用物理问题本身的性质来修正上下游基点 ($i \mp 1$) 物理量对中心基点物理量的贡献, 由此获得局部线化方程的精确数值解格式或数值解格式. 具体做法是: 提高格式精度要求消除格式修正微分方程的截断误差, 截断误差是步长 (一维情况下为 Δx) 的某种幂级数. 由于选定了微商用直接差分近似, 因此需要把非微商项 (包括微商系数和源项) 摄动展开为步长的幂级数. 摄动展开幂级数中 Δx^m ($m \geq 1, 2$) 的系数为待定, 利用微分方程本身提供的关系, 通过消除修正微分方程的截断误差诸项即可求出它们, 确定摄动展开幂级数诸系数的同时得到局部线化方程的摄动精确数值解 (PENS) 格式或摄动数值解 (PNS) 格式. 文 [28,29] 获得扩散对流方程的 PENS 格式, 文 [30~32] 分别给出对流扩散反应方程, 线性双曲和抛物型方程的 PENS 格式, 给出 KdV 方程的 PNS 格式. 对一、二和三维的情况, PENS 和 PNS 格式分别使用三、五和七基点.

以下诸小节针对对流扩散 (CD) 方程、对流扩散反应 (CDR) 方程、二阶双曲型和抛物型方程、KdV 方程简要介绍摄动精确数值解 (PENS) 和摄动数值解 (PNS) 格式的基本思路, 已取得的主要研究结果, 数值实验研究及与有关算法的比较见第 5 节.

3.1 一维对流扩散 (CD) 方程

$$u \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + S \quad (3.1)$$

的一阶迎风差分格式为

$$\frac{\nu}{\Delta x^2} \left[\left(1 - \frac{1 - \alpha}{2} \tilde{u}_i \Delta x \right) \varphi_{i+1} - (2 + \alpha \tilde{u}_i \Delta x) \varphi_i + \left(1 + \frac{1 + \alpha}{2} \tilde{u}_i \Delta x \right) \varphi_{i-1} + S_i \right] = 0 \quad (3.2)$$

其中 $\alpha = \text{sign } u_i$, $\tilde{u}_i = u_i / \nu$. 今把微商系数 \tilde{u}_i 和源项 S_i 加以修正, 即把它们摄动展开为 Δx 的幂级数

$$\tilde{u}_p = \tilde{u} + u_1 \Delta x + u_2 \Delta x^2 + \dots \quad (3.3a)$$

$$S_p = S + S_1 \Delta x + S_2 \Delta x^2 + \dots \quad (3.3b)$$

并有摄动格式及其修正微分方程

$$\frac{\nu}{\Delta x^2} \left[\left(1 - \frac{1-\alpha}{2} \tilde{u}_p \Delta x \right) \varphi_{i+1} - (2 + \alpha \tilde{u}_p \Delta x) \varphi_i + \left(1 + \frac{1+\alpha}{2} \tilde{u}_p \Delta x \right) \varphi_{i-1} \right] + S_p = 0 \quad (3.4)$$

$$\tilde{u}_p \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + S_p + \tilde{E}_{p1} \Delta x + \tilde{E}_{p2} \Delta x^2 + \dots \quad (3.5)$$

其中

$$\left. \begin{aligned} \tilde{E}_{p,2n-1} &= \frac{\alpha \tilde{u}_p}{(2n)!} \frac{\partial^{2n} \varphi}{\partial x^{2n}} \\ \tilde{E}_{p,2n} &= -\frac{\tilde{u}_p}{(2n+1)!} \frac{\partial^{2n+1} \varphi}{\partial x^{2n+1}} + \frac{2}{(2n+2)!} \frac{\partial^{2n+2} \varphi}{\partial x^{2n+2}} \end{aligned} \right\} \quad (n=1, 2, \dots) \quad (3.6)$$

利用对流扩散 (CD) 方程 (3.1) 本身的固有关系推出

$$\frac{\partial^{n+2} \varphi}{\partial x^{n+2}} = \frac{\partial^n}{\partial x^n} \left(\tilde{u} \frac{\partial \varphi}{\partial x} - S_p - \tilde{E}_{p1} \Delta x - \tilde{E}_{p2} \Delta x^2 - \dots \right) \quad (3.7)$$

假定 \tilde{u} 和 S 在 (x_{i-1}, x_{i+1}) 区间内为常数, 即取局部线性近似, 求得

$$\tilde{u}_p \Delta x = \sum_{n=1}^N \frac{(\tilde{u}_i \Delta x)^{2n-1}}{(2n-1)!} + \alpha \sum_{n=1}^N \frac{(\tilde{u}_i \Delta x)^{2n}}{(2n)!} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \sinh(\tilde{u} \Delta x) + \alpha [\cosh(\tilde{u} \Delta x) - 1] \quad (3.8a)$$

$$S_p = \frac{S}{\tilde{u}} \tilde{u}_p \quad (3.8b)$$

把 (3.8) 诸式代入格式 (3.4), 得到摄动精确数值解 (PENS) 格式为

$$\frac{\nu}{2\Delta x^2} \{ [(1-\alpha) + (1+\alpha)e^{-\tilde{u}\Delta x}] \varphi_{i+1} - [2 + (1+\alpha)e^{-\tilde{u}\Delta x} + (1-\alpha)e^{\tilde{u}\Delta x}] \varphi_i + [(1+\alpha) + (1-\alpha)e^{\tilde{u}\Delta x}] \varphi_{i-1} \} + \frac{S}{2\tilde{u}\Delta x} [2\alpha + (1-\alpha)e^{\tilde{u}\Delta x} - (1+\alpha)e^{-\tilde{u}\Delta x}] = 0 \quad (3.9)$$

不难证明离散方程 (3.9) 的解 (通解加特解)

$$\varphi_i = C_1 + C_2 \left[\frac{(1+\alpha) + (1-\alpha)e^{\tilde{u}\Delta x}}{(1-\alpha) + (1+\alpha)e^{-\tilde{u}\Delta x}} \right]^i + \frac{\tilde{S}}{\tilde{u}} x_i \quad (\tilde{S} = S/\nu, x_i = i\Delta x) \quad (3.10)$$

在固定 $x_i (= i\Delta x)$ 且 $\Delta x \rightarrow 0$ 的极限下趋向线性化 CD 方程 (3.1) 的解, 因此格式 (3.9) 为精确数值解格式. 该格式使用三基点, 具有系数矩阵无条件对角占优、迎风性、紧致性且保留了一阶迎风格式的简洁结构形式, 特别是它包含的指数项均以 $\exp(-|\tilde{u}\Delta x|)$ 的形式出现, 因此不存在常见指数型格式中存在的网格雷诺数大时出现数字溢出的问题. 值得指出: 中心差分格式在 $|\tilde{u}\Delta x| > 2$ 时不具有 TVD 性质, 而由它经摄动得到的 PENS 格式对任意大小的 $|\tilde{u}\Delta x|$ 值均具有 TVD 性质 (参见附录). 一维的结果已推广到二维和三维情况, 二维和三维 PENS 格式同样具有上述优点, 且分别使用五个和七个基点.

3.2 对流扩散反应 (CDR) 方程

$$\nu \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - u \frac{\partial \varphi}{\partial x} + g\varphi = 0, \quad 0 < \nu \ll 1 \quad (3.11)$$

其中 $g\varphi$ 为反应项. 以 ν 为小参数的奇异摄动方程 (3.11) 在流体物理的许多方面有用, 例如边界层效应, 对流扩散反应流动、风生浪问题等 [26,40~43]. 对 CDR 方程 (3.11) 的线性化问题, 令

$$\varphi = ze^{\frac{x}{2\nu}} \quad (3.12)$$

$$\frac{\partial^2 z}{\partial x^2} - \lambda^2 z = 0 \quad \left(\lambda^2 = \frac{u^2 - 4g\nu}{4\nu^2} \right) \quad (3.13)$$

方程 (3.13) 的直接差分近似为

$$\frac{1}{\Delta x^2}(z_{i+1} - 2z_i + z_{i-1}) - \lambda^2 z_i = 0 \quad (3.14)$$

把系数 λ^2 摄动展开为 Δx 的幂级数

$$\lambda_p = \lambda^2 + \lambda_2 \Delta x^2 + \lambda_4 \Delta x^4 + \dots \quad (3.15)$$

得到如下摄动格式及其修正微分方程

$$\frac{1}{\Delta x^2}(z_{i+1} - 2z_i + z_{i-1}) - \lambda_p z_i = 0 \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial^2 z}{\partial x^2} - \lambda^2 z + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{(2n+2)!} \frac{\partial^{2n+2} z}{\partial x^{2n+2}} \Delta x^{2n} - \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_{2n} \Delta x^{2n} z_i = 0 \quad (3.17)$$

由方程 (3.17) 求出

$$\lambda_{2n} = \frac{2}{(2n+2)!} \lambda^{2n+2} \quad (3.17a)$$

把 λ_{2n} 诸式代入格式 (3.16), 得到 CDR 方程 (3.11) 的 PENS 格式为

$$\left(\frac{1-\alpha}{2} + \frac{1+\alpha}{2} e^{-\tilde{u}\Delta x} \right) \varphi_{j+1} - (e^{b\Delta x} + e^{-b\Delta x}) \left(\frac{1-\alpha}{2} e^{\tilde{u}\Delta x} + \frac{1+\alpha}{2} e^{-\tilde{u}\Delta x} \right) \varphi_j + \left(\frac{1+\alpha}{2} + \frac{1-\alpha}{2} e^{\tilde{u}\Delta x} \right) \varphi_{j-1} = 0 \quad (3.18)$$

$$2\nu b = \begin{cases} \sqrt{u^2 - 4g\nu} & (u^2 - 4g\nu) > 0 \\ i\sqrt{4g\nu - u^2} & (u^2 - 4g\nu) < 0 \end{cases} \quad (3.19)$$

不难证明在固定 $x_j = j\Delta x$, 令 $\Delta x \rightarrow 0$ 的极限下, 离散方程 (3.18) 的解就是微分方程 (3.11) 的解. 对有多个极值点的 CDR 方程 (3.11) 的计算表明: PENS 格式 (3.18) 在较粗网格下即可给出与准确解精确相符的结果, 见表 1.

表 1 PENS、二阶中心和一阶前差格式计算 CDR 方程 $z'' + 2\pi z' + \frac{125}{4}\pi^2 z = 0$ ($z(0) = 1, z(1) = 0$) 的最大绝对误差、相对误差和计算时间的比较

	格式	位置 x	最大误差		CPU 时间 (10^{-4} s)
			绝对差值	相对误差	
1/20	PENS	0.1	2.40×10^{-15}	2.10×10^{-14}	0.32
	中心	0.1	0.555	4.86	0.16
	前差	0.1	0.508	4.45	0.14
1/100	PENS	0.08	2.29×10^{-14}	1.57×10^{-13}	1.6
	中心	0.08	1.81×10^{-2}	0.124	0.81
	前差	0.08	0.166	1.14	0.80
1/1000	PENS	0.076	1.73×10^{-12}	8.64×10^{-12}	17
	中心	0.077	1.81×10^{-4}	9.68×10^{-4}	9.2
	前差	0.078	1.81×10^{-2}	0.114	8.7

3.3 二维对流扩散 (CD) 方程

考虑对流扩散方程

$$u \frac{\partial \varphi}{\partial x} + v \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \nu \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right) + S \quad (3.20)$$

把 CD 方程 (3.20) 分裂为

$$u \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{1}{2} S + S_c \quad (3.21a)$$

$$v \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \nu \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{1}{2} S - S_c \quad (3.21b)$$

从方程 (3.21a) 和 (3.21b) 的一阶迎风差分格式出发, 把对流系数 u/ν , v/ν , 和源项 S , S_c 摄动展开为 Δx 和 Δy 的幂级数, 通过类似于 3.1 节中的运算, 可求得摄动幂级数中 Δx^n 和 Δy^n 的系数以及与方程 (3.21a) 和 (3.21b) 的一阶迎风格式相对应的两个摄动格式, 再把两个摄动格式相加消去 S_c , 最后得到 CD 方程 (3.20) 的如下 PENS 格式

$$\begin{aligned} & \frac{u_{ij}}{A_{xij} \Delta x} \left\{ [(1 - \alpha_1) + (1 + \alpha_1)e^{-R_{\Delta x}}] \varphi_{i+1,j} - [2 + (1 + \alpha_1)e^{-R_{\Delta x}} + \right. \\ & \quad \left. (1 - \alpha_1)e^{R_{\Delta x}}] \varphi_{i,j} + [(1 + \alpha_1) + (1 - \alpha_1)e^{R_{\Delta x}}] \varphi_{i-1,j} \right\} + \\ & \frac{v_{ij}}{A_{yij} \Delta y} \left\{ [(1 - \alpha_2) + (1 + \alpha_2)e^{-R_{\Delta y}}] \varphi_{i,j+1} - [2 + (1 + \alpha_2)e^{-R_{\Delta y}} + \right. \\ & \quad \left. (1 - \alpha_2)e^{R_{\Delta y}}] \varphi_{i,j} + [(1 + \alpha_2) + (1 - \alpha_2)e^{R_{\Delta y}}] \varphi_{i,j-1} \right\} + S_{ij} = 0 \end{aligned} \quad (3.22)$$

其中 $R_{\Delta x_i} = \tilde{u}_{ij} \Delta x_i$, $R_{\Delta y_j} = \tilde{v}_{ij} \Delta y_j$

$$A_{xij} = 2\alpha_1 + (1 - \alpha_1)e^{R_{\Delta x}} - (1 + \alpha_1)e^{-R_{\Delta x}} \quad (3.22a)$$

$$A_{yij} = 2\alpha_2 + (1 - \alpha_2)e^{R_{\Delta y}} - (1 + \alpha_2)e^{-R_{\Delta y}} \quad (3.22b)$$

不难证明在固定 $x_i (= i\Delta x)$ 和 $y_j (= j\Delta y)$, 而令 $\Delta x \rightarrow 0$ 和 $\Delta y \rightarrow 0$ 的极限下, 离散方程 (3.22) 的解趋向 CD 方程 (3.20) 的解. 三维情况与二维情况类似.

3.4 二阶双曲型和抛物型方程的 PENS 格式

对双曲型方程的初边值问题

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ u|_{x=0} &= u|_{x=l} = 0 \\ u|_{t=0} &= \varphi(x), \quad \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{t=0} = 0 \end{aligned} \right\} \quad (3.23)$$

叙述简明起见, 考虑 $\varphi(x) = \sin \frac{n\pi x}{l}$ 的情况. 先把变量进行分离

$$u = T(t)X(x) \quad (3.24)$$

关于 T 和 X 的直接差分近似为

$$\frac{1}{\Delta t^2} (T^{n+1} - 2T^n + T^{n-1}) = \left(\frac{an\pi}{l} \right)^2 T^n \quad (3.25a)$$

$$\frac{1}{\Delta x^2} (X_{i+1} - 2X_i + X_{i-1}) = \left(\frac{n\pi}{l} \right)^2 X_i \quad (3.25b)$$

把差分方程 (3.25) 右端系数摄动展开成 Δt^{2n} 和 $(\Delta x)^{2n}$ 的幂级数, 通过类似于前面的运算, 得到如下的 PENS 格式

$$T^{n+1} - 2T^n \cos\left(\frac{an\pi\Delta t}{l}\right) + T^{n-1} = 0 \quad (3.26a)$$

$$X_{i+1} - 2X_i \sin\left(\frac{n\pi\Delta x}{l}\right) + X_{i-1} = 0 \quad (3.26b)$$

在固定 $T^n (= n\Delta t)$ 和 $x_i (= i\Delta x)$, 而令 $\Delta x \rightarrow 0$ 和 $\Delta t \rightarrow 0$ 的极限下离散方程 (3.24) 和 (3.26) 的解趋向双曲方程初边值问题 (3.23) 的解

$$u = \cos\frac{an\pi t}{l} \sin\frac{n\pi x}{l} \quad (3.27)$$

对抛物方程的初边值问题

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ u|_{x=0} &= u|_{x=l} = 0 \\ u|_{t=0} &= \varphi(x) \end{aligned} \right\} \quad (3.28)$$

做与双曲型方程类似的运算, 求得初边值问题 (3.28) 的 PENS 格式为

$$u = T(t)X(x) \quad (3.29a)$$

$$T^{n+1} - T^n \exp\left[-\left(\frac{an\pi}{l}\right)^2 \Delta t\right] = 0 \quad (3.29b)$$

$$X_{i+1} - 2X_i \sin\left(\frac{n\pi\Delta x}{l}\right) + X_{i-1} = 0 \quad (3.29c)$$

在固定 $T^n (= n\Delta t)$ 和 $x_i (= i\Delta x)$, 而令 $\Delta x \rightarrow 0$ 和 $\Delta t \rightarrow 0$ 的极限下离散方程 (3.29) 的解趋向抛物方程初边值问题 (3.28) 的解

$$u = \sin\frac{n\pi x}{l} \exp\left[-\left(\frac{an\pi}{l}\right)^2 t\right] \quad (3.30)$$

3.5 非定常问题, KdV 方程的摄动数值解 (PNS) 格式

对 KdV 方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \beta u \frac{\partial u}{\partial x} + \mu \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0 \quad (3.31)$$

采用分裂方法. 第一步令

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \beta u \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (3.32)$$

得到

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \beta u_i^n U_{x_i}^n \frac{\Delta t}{\Delta x} + \frac{\beta^2}{2} \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} \left[2u_i^n (U_{x_i}^n)^2 + \frac{1}{2} u_i^n (U_{x_{i+1}}^n - U_{x_{i-1}}^n) \right] \quad (3.33)$$

其中 $U_x^n = u_x^n \Delta x$. 第二步

$$\beta u \frac{\partial u}{\partial x} + \mu \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0 \quad (3.34)$$

$$\frac{1}{\Delta x^2} (U_{x_{i+1}}^n - 2U_{x_i}^n + U_{x_{i-1}}^n) + \frac{\beta u_i^n}{\mu} U_{x_i}^n = 0 \quad (3.35)$$

把格式 (3.35) 中 $U_{x,i}^n$ 的系数摄动展开, 通过类似于前面的运算, 得到格式 (3.35) 的摄动精确数值解 (PENS) 格式, 在 $\beta u_i^n/\mu < 0$ 和 > 0 时分别为

$$U_{x,i+1}^n - \left[\exp\left(\Delta x \sqrt{\left|\frac{\beta u_i^n}{\mu}\right|}\right) + \exp\left(-\Delta x \sqrt{\left|\frac{\beta u_i^n}{\mu}\right|}\right) \right] U_{x,i}^n + U_{x,i-1}^n = 0 \quad (3.36)$$

$$U_{x,i+1}^n - 2 \cos\left(\Delta x \sqrt{\left|\frac{\beta u_i^n}{\mu}\right|}\right) U_{x,i}^n + U_{x,i-1}^n = 0 \quad (3.37)$$

KdV 方程 (3.31) 的数值计算是由 PENS 格式 (3.36) 和 (3.37) 算出 n 时间层上的 $U_{x,i}^n$, 而由格式 (3.33) 算出 $(n+1)$ 时间层上的 U_i^{n+1} . 应该指出, 这里的算法仅使用三个基点, 而 KdV 方程的其它差分算法均使用五个基点 [44,45]. 此外, 格式 (3.33) 并非 KdV 方程的精确数值解格式, 因此称为摄动数值解 (PNS) 格式. 一般说来, 找到局部线性化微分方程的 PENS 格式比较困难, 但总能给出局部线性化微分方程的 PNS 格式.

需要说明的是: PENS 格式只能从微分方程的直接差分近似出发通过摄动获得, 对微分方程的其它差分格式 (例如指数型差分, 多基点差分格式等) 进行摄动并不能获得 PENS 格式, 说明差分近似“不超出”推导运动微分方程时的物理考虑和数学处理具有特殊的作用, 直接差分近似格式和 PENS 格式显然都符合“不超出”的要求. 流体运动方程为二阶拟线性方程, 对它们的直接差分近似进行摄动均可获得它们的局部线性化方程的 PENS 格式, 在非定常情况下则为摄动数值解 (PNS) 格式 (例如节 3.5 中的 KdV 方程的 PNS 格式). PENS 格式与精确数值解 (ENS) 格式 [19,20,26] 和有限分析 (FA) 格式 [21~26] 具有同样的性质, 它们不仅在离散网格点上而且在网格内均满足待求解的方程, 因此实际上它们超出了有限差分方法的范畴. 它们可准确模拟对流效应, 且不存在有限差分和有限元方法中的伪数值扩散和负浓度解问题, 对任意大小的网格 Reynolds 数 $R_{\Delta x}$ 它们都一致稳定和收敛. 特别是 PENS 格式的指数项均以 $\exp(-|R_{\Delta x}|)$ 的形式出现, 不存在 ENS 格式和 FA 格式中指数项计算在 $|R_{\Delta x}|$ 很大时出现数字溢出的问题, 且二、三维 PENS 格式远比 FA 格式简单. 应当指出, 摄动有限差分 (PFD) 方法与微分方程的奇异摄动方法 [46,47] 并无关系, 微分摄动问题包括小 (或大) 参数, 并求小参数摄动展开解. 差分问题可包含或不包含小参数, 非微商项按步长摄动展开, 求得摄动精确数值解 (PENS) 格式.

4 摄动高精度差分 (PHD) 方法

摄动高精度差分 (PHD) 方法 [33~35] 的基本思想和具体做法与 PENS 方法大体相同, 区别是: PENS 方法用直接差分代替微商, 假定被摄动的量在网格内为常数, 即取局部线性 (方程) 近似, 而 PHD 方法可用不同形式的差分 (例如直接差分、指数型差分等) 代替微商, 假定被摄动的量在网格内为变量即取非线性近似, 因此需要处理被摄动量各阶导数的差分近似. 文 [27, 33~39] 给出对流扩散方程的两种形式的 PHD 格式, 在一、二和三维分别使用三、五和七个基点的条件下, 所得 PHD 格式具有四阶精度.

4.1 对流扩散方程的指数型摄动高精度差分 (PHD) 格式

二维对流扩散 (CD) 方程

$$2u \frac{\partial \varphi}{\partial x} + 2v \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \nu \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right) + \nu S \quad (4.1)$$

的二阶指数型差分格式为

$$a_{ij} \varphi_{ij} = \Delta x^2 (a_{i,j-1} \varphi_{i,j-1} + a_{i,j+1} \varphi_{i,j+1}) + \Delta y^2 (a_{i-1,j} \varphi_{i-1,j} + a_{i+1,j} \varphi_{i+1,j}) + \Delta x^2 \Delta y^2 S_{ij} \quad (4.2)$$

其中

$$a_{ij} = \Delta x^2(a_{i,j-1} + a_{i,j+1}) + \Delta y^2(a_{i-1,j} + a_{i+1,j}) \quad (4.2a)$$

$$a_{i\mp 1,j} = \exp(\pm \tilde{u}_{ij} \Delta x), \quad a_{i,j\mp 1} = \exp(\pm \tilde{v}_{ij} \Delta y) \quad (4.2b)$$

把格式 (4.2) 中的系数 a_{ij} , $a_{i\mp 1,j}$ 和 $a_{i,j\mp 1}$ 以及源项 S_{ij} 摄动展开到二阶, 得到如下摄动高精度差分 (PHD) 格式

$$a_{pij}\varphi_{ij} = \Delta x^2(a_{pi,j-1}\varphi_{i,j-1} + a_{pi,j+1}\varphi_{i,j+1}) + \Delta y^2(a_{pi-1,j}\varphi_{i-1,j} + a_{pi+1,j}\varphi_{i+1,j}) + \Delta x^2\Delta y^2 S_{pij} \quad (4.3)$$

$$a_{pij} = \Delta x^2(a_{pi,j-1} + a_{pi,j+1}) + \Delta y^2(a_{pi-1,j} + a_{pi+1,j}) \quad (4.3a)$$

$$a_{pi\mp 1,j} = \exp(\pm \tilde{u}_{pij} \Delta x), \quad a_{pi,j\mp 1} = \exp(\pm \tilde{v}_{pij} \Delta y) \quad (4.3b)$$

$$\tilde{u}_p = \tilde{u} + \tilde{u}_2 \Delta x^2, \quad \tilde{v}_p = \tilde{v} + \tilde{v}_2 \Delta y^2 \quad (4.3c)$$

$$\tilde{S}_p = S + S_{2x} \Delta x^2 + S_{2y} \Delta y^2 \quad (4.3d)$$

把摄动诸式 (4.3a)~(4.3d) 代入摄动格式 (4.3), 假定 \tilde{u} 和 S 在区间 (x_{i-1}, x_{i+1}) 内为变量即取非线性近似, 利用 CD 方程 (4.1) 本身提供的二阶和一阶偏导数之间的关系, 经过运算得到

$$\tilde{u}_2 = \frac{1}{12} \left(2\tilde{u} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} + \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial x^2} \right) + O(\Delta x^2) \quad (4.4a)$$

$$S_{2x} = \frac{1}{12} \left[2 \left(\tilde{u}^2 + 2\tilde{u} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} \right) S_x - 2\tilde{u} \frac{\partial S_x}{\partial x} + \frac{\partial^2 S_x}{\partial x^2} \right] \quad (4.4b)$$

$$S_x = S + \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} - 2v \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) \quad (4.4c)$$

\tilde{v}_2 , S_{2y} 和 S_y 是在 \tilde{u}_2 , S_{2x} 和 S_x 中分别把 \tilde{u} , x 和 y 换成 \tilde{v} , y 和 x 得到的结果. 把上述摄动展开的结果代入格式 (4.3) 得到指数型四阶紧致格式即摄动高精度差分 (PHD) 格式, 该格式的结构与原始指数型格式 (4.2) 的结构完全相同, 因此, PHD 格式 (4.3) 具有迎风效应和系数矩阵对角占优的特性. 三维 CD 方程的指数型 PHD 格式同样具有上述性质.

4.2 对流扩散 (CD) 方程的另一种摄动高精度差分 (PHD) 格式

下面简介与 CD 方程一阶迎风格式对应的四阶摄动差分 (PHD) 格式. 把二维 CD 方程

$$u \frac{\partial \varphi}{\partial x} + v \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \nu \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right) + \nu S \quad (4.5)$$

分裂为

$$u \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{1}{2} S + S_c \quad (4.6a)$$

$$v \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{1}{2} S - S_c \quad (4.6b)$$

从 CD 方程 (4.6a) 和 (4.6b) 的一阶迎风格式出发, 把格式中的系数 $\tilde{u} = u/\nu$ 和 $\tilde{v} = v/\nu$ 以及源项 S 和 S_c 摄动展开为 Δx 和 Δy 的幂级数, 得到两个摄动格式, 由这两个格式相加消去 S_c 得到二维 CD 方程 (4.5) 的如下摄动高精度差分 (PHD) 格式

$$\frac{\tilde{u}_{ij}}{\tilde{u}_{pij} \Delta x^2} \left[\left(1 - \frac{1 - \alpha_1}{2} \tilde{u}_{pij} \Delta x \right) \varphi_{i+1,j} - (2 + \alpha_1 \tilde{u}_{pij} \Delta x) \varphi_{ij} + \left(1 + \frac{1 + \alpha_1}{2} \tilde{u}_{pij} \Delta x \right) \varphi_{i-1,j} \right] +$$

$$\frac{\tilde{v}_{ij}}{\bar{v}_{pij}\Delta y^2} \left[\left(1 - \frac{1-\alpha_2}{2}\tilde{v}_{pij}\Delta y \right) \varphi_{i,j+1} - (2 + \alpha_2\tilde{v}_{pij}\Delta y)\varphi_{ij} + \left(1 + \frac{1+\alpha_2}{2}\tilde{v}_{pij}\Delta y \right) \varphi_{i-1,j} \right] + \frac{1}{2} \left(S_{px} \frac{\tilde{u}_{ij}}{\bar{u}_{pij}} + S_{py} \frac{\tilde{v}_{ij}}{\bar{v}_{pij}} \right) = 0 \quad (4.7)$$

其中 $\alpha_1 = \text{sign } \tilde{u}_{ij}$, $\alpha_2 = \text{sign } \tilde{v}_{ij}$. 对二阶精度摄动差分 (PHD) 格式, 有

$$\tilde{u}_{pij}\Delta x = \bar{u}_{pij}\Delta x = \tilde{u}_{ij}\Delta x + \frac{\alpha_1}{2}(\tilde{u}_{ij}\Delta x)^2 \quad (4.8a)$$

$$S_{px} = \frac{S_{ij}}{\tilde{u}_{ij}}\bar{u}_{pij} \quad (4.8b)$$

对三阶精度摄动差分格式, 有

$$\tilde{u}_{pij}\Delta x = \bar{u}_{ij}\Delta x + \frac{1}{12} \left(\tilde{u}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} \Big|_{ij} + \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial x^2} \Big|_{ij} \right) \Delta x^3 \quad (4.9a)$$

$$\bar{u}_{pij}\Delta x = \tilde{u}_{ij}\Delta x + \frac{\alpha_1}{2!}(\tilde{u}_{ij}\Delta x)^2 + \frac{1}{3!}(\tilde{u}_{ij}\Delta x)^3 \quad (4.9b)$$

$$S_{px} = \frac{S_{ij}}{\tilde{u}_{ij}}\bar{u}_{pij} + \frac{1}{12} \left(\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \Big|_{ij} + 2S_{ij} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} \Big|_{ij} - \tilde{u}_{ij} \frac{\partial S}{\partial x} \Big|_{ij} \right) \Delta x^2 \quad (4.9c)$$

对四阶精度摄动差分格式, 有

$$\tilde{u}_{pij}\Delta x = \bar{u}_{ij}\Delta x + \frac{1}{12} \left(\tilde{u}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} \Big|_{ij} + \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial x^2} \Big|_{ij} \right) \Delta x^3 + \frac{\alpha_1 \tilde{u}_{ij}}{12} \left(\frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial x^2} \Big|_{ij} - \frac{7}{2} \tilde{u}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} \Big|_{ij} \right) \Delta x^4 \quad (4.10a)$$

$$\bar{u}_{pij}\Delta x = \tilde{u}_{ij}\Delta x + \frac{\alpha_1}{2!}(\tilde{u}_{ij}\Delta x)^2 + \frac{1}{3!}(\tilde{u}_{ij}\Delta x)^3 + \frac{\alpha_1}{4!}(\tilde{u}_{ij}\Delta x)^4 \quad (4.10b)$$

$$S_{px} = \frac{S_{ij}}{\tilde{u}_{ij}}\bar{u}_{pij} + \frac{1}{12} \left(\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \Big|_{ij} + 2S_{ij} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} \Big|_{ij} - \tilde{u}_{ij} \frac{\partial S}{\partial x} \Big|_{ij} \right) \Delta x^2 + \frac{\alpha_1}{24} \left[\tilde{u}_{ij} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \Big|_{ij} - \tilde{u}_{ij}^2 \frac{\partial S}{\partial x} \Big|_{ij} + 2 \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} \frac{\partial S}{\partial x} \right) \Big|_{ij} + \left(\tilde{u} S \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} \right) \Big|_{ij} + 2 \left(S \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial x^2} \right) \Big|_{ij} \right] \Delta x^3 \quad (4.10c)$$

在 \tilde{u}_{pij} , \bar{u}_{pij} 和 S_{px} 的表达式 (4.8)~(4.10) 中把 \tilde{u}_{ij} , x 和 α_1 分别换成 \tilde{v}_{ij} , y 和 α_2 即得到 \tilde{v}_{pij} , \bar{v}_{pij} 和 S_{py} 的表达式. 在数值计算中, 表达式 (4.9) 和 (4.10) 中的诸导数 $\frac{\partial \tilde{u}}{\partial x}$, $\frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial x^2}$, $\frac{\partial S}{\partial x}$ 和 $\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}$ 可用中心差分来近似, 因此直到四阶精度, 摄动高精度差分格式 (4.7) 仍不需要增加新的基点, 即仍为五基点, 且保持了一阶迎风格式的简洁结构形式, 具有迎风性和系数矩阵无条件对角占优. 三维摄动差分格式性质类似, 为七基点格式. 应该指出, 由于 PHD 格式考虑了被摄动量在网格内的变化, 因此能够较好地计及非线性效应, 但是为了保证 PHD 格式在一、二和三维情况下只使用三、五和七基点, 被摄动量的导数不能超过二阶, 这样 PHD 格式的精度限于四阶.

5 数值实验与比较

5.1 关于精确数值解 (ENS) 格式

一维对流扩散方程和一维可压缩 NS 方程的局部线化方程的精确数值解 (ENS) 格式为指数型格式 [20,21,26]. 二维和三维不可压缩局部线化 NS 方程的 ENS 格式被称为有限分析 (FA) 格式, 系采用分离变量法求出的 [22~26]. ENS 格式和 FA 格式可较准确地反映流动问题的物理

特性,既可准确模拟对流效应,又无有限差分和有限元方法中存在的伪数值扩散和负浓度解问题. ENS 格式和 FA 格式对大 Reynolds 数 NS 方程和大 Peclet 数对流传热方程是一致稳定和收敛的,且 ENS 格式可微. 经微分运算得到的结果也较准确. 因此从理论上说, ENS 格式和 FA 格式是计算大 Peclet 数对流传热问题和计算高 Reynolds 数流动问题的理想算法. 问题是 ENS 格式和 FA 格式中含有 $\exp(|R_{\Delta x}|)$ 这样的因子,因此 Reynolds 数的提高受到计算机允许数字大小有限的限制. 二维和三维有限分析 (FA) 格式又相当复杂,例如对二维对流扩散方程

$$2A \frac{\partial \varphi}{\partial x} + 2B \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \quad (5.1)$$

离散单元内点函数值 φ_p 由单元边界上八个点的参量所确定 (为九基点格式),即

$$\varphi_p = c_e \varphi_e + c_w \varphi_w + c_s \varphi_s + c_n \varphi_n + c_{ne} \varphi_{ne} + c_{nw} \varphi_{nw} + c_{se} \varphi_{se} + c_{sw} \varphi_{sw} \quad (5.2)$$

其中

$$c_e = -e^{-A\Delta x} F'_2 + (e^{-A\Delta x + B\Delta y} - e^{-A\Delta x - B\Delta y})(B\Delta y) E'_2 \quad (5.3a)$$

$$c_{ne} = \frac{1}{2} (F_2 e^{-B\Delta y} - e^{-A\Delta x} F'_2 + e^{-A\Delta x - B\Delta y}) \left[\frac{1}{2} (E_1 + E'_1) + A\Delta x E_2 + B\Delta y E'_2 \right] \quad (5.3b)$$

$$E_i = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{-(-1)^m \lambda_m \Delta x}{[(A\Delta x)^2 + (\lambda_m \Delta x)^2]^{3/2} \text{ch } \mu_m \Delta y} \quad i = 1, 2 \quad (5.3c)$$

$$F_2 = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(A\Delta x)^2 - (\lambda_m \Delta x)^2}{[(A\Delta x)^2 + (\lambda_m \Delta x)^2]^2 \text{ch } \mu_m \Delta y} \quad (5.3d)$$

$$\lambda_m = \frac{(2m-1)\pi}{2\Delta x}, \quad \mu_m = (A^2 + B^2 + \lambda_m^2)^{1/2} \quad (5.3e)$$

c_w, c_s 和 c_n 的表达式与 c_e 的表达式类似. c_{nw}, c_{se} 和 c_{sw} 的表达式与 c_{ne} 的表达式类似. 式 (5.3a) 和 (5.3b) 中 E'_1, E'_2 和 F'_2 是在 E_1, E_2 和 F_2 中分别把 A 换成 B , Δx 换成 Δy , Δy 换成 Δx , λ_m 换成 λ'_m , μ_m 换成 μ'_m 得到的结果. λ'_m 和 μ'_m 是在 λ_m 和 μ_m 中把 Δx 换成 Δy 得到的结果. 三维情况下 FA 格式使用 19 个基点,单元内点值 φ_p 的计算包含 18 个类似于式 (5.3c) 和 (5.3d) 的无穷级数求和.

摄动精确数值解 (PENS) 格式的性质与 FA 格式相同,但在二维和三维情况下仅分别使用五和七基点,形式远比 FA 格式简洁,运算量明显减少. 特别是 PENS 格式包含的指数项均以 $\exp(-|R_{\Delta x}|)$ 的形式出现,参见节 3.1~3.4,因此 $|R_{\Delta x}|$ 大时不存在计算 $e^{|R_{\Delta x}|}$ 的“溢出”的问题.

5.2 数值实验

对一、二和三维对流扩散反应方程、双曲方程和抛物型方程文 [28~32] 已给出一些 PENS 格式,文 [27, 33~39] 则给出了一、二和三维对流扩散方程的指数型和多项式型摄动高精度差分 (PHD) 格式. 这些格式已成功地用于计算一些模型方程、二维和三维模型流动、二维方腔内的不可压缩流动、热驱动的方腔内流动等,均获得与其它精确数值解格式或“标准”(Benchmark) 数值解一致的满意数值结果. 例如方腔内热驱动的自然对流问题,该问题的控制方程和边界条件

$$\nabla^2 \psi = -\zeta \quad (5.4)$$

$$\nabla^2 \zeta = Pr^{-1} \left(u \frac{\partial \zeta}{\partial x} + v \frac{\partial \zeta}{\partial y} \right) - Ra \frac{\partial T}{\partial x} \quad (5.5)$$

$$\nabla^2 T = u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} \quad (5.6)$$

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v = -\frac{\partial \psi}{\partial x} \quad (5.7)$$

$$x = 0, \quad T = 1, \quad x = 1, \quad T = 0 \quad (5.8a)$$

$$y = 0, 1, \quad \frac{\partial T}{\partial y} = 0 \quad (5.8b)$$

$$x = 0 \text{ 和 } 1, \quad y = 0 \text{ 和 } 1, \quad \psi = \frac{\partial \psi}{\partial n} = 0 \quad (5.8c)$$

其中, ψ, ζ 和 T 为流函数、涡量和温度, u 和 v 为 x 和 y 方向的流速分量, Pr, Ra 和 Re 为 Prantal 数、Rayleigh 数和 Reynolds 数. 若干典型数值实验的结果见表 2~ 表 4. 表中 ψ_{mid} 为

表 2 方腔自然对流典型参数计算结果 ($Pr = 0.71, Ra = 10^4$)

h	$ \psi_{mid} $	U_{max}	V_{max}	Nu_0	Nu_{max}	Nu_{min}
		$y (x = 0.5)$	$x (y = 0.5)$		$y (x = 0)$	$y (x = 0)$
1/10	5.0705	15.2835	19.3567	2.3333	3.6927	0.5915
		0.8215	0.1280		0.1697	1
1/20	5.0733	16.1850	19.6555	2.2337	3.5075	0.5897
		0.8233	0.1195		0.1401	1
1/30	5.0735	16.1809	19.6297	2.2361	3.5180	0.5855
		0.8233	0.1191		0.1435	1
BMS	5.071	16.178	19.617	2.238	3.528	0.586
		0.823	0.119		0.143	1

表 3 方腔自然对流典型参数计算结果 ($Pr = 0.71, Ra = 10^5$)

h	$ \psi_{mid} $	U_{max}	V_{max}	Nu_0	Nu_{max}	Nu_{min}
		$y (x = 0.5)$	$x (y = 0.5)$		$y (x = 0)$	$y (x = 0)$
1/10	9.4156	35.2363	50.2577	4.8730	8.7502	0.7409
		0.8560	0.0763		0.2005	1
1/20	9.2056	34.9781	69.0465	4.7053	8.3506	0.7289
		0.8530	0.0672		0.1023	1
1/30	9.1105	34.6977	68.7055	4.5220	7.8126	0.7278
		0.8550	0.0669		0.0801	1
BMS	9.111	34.730	68.590	4.509	7.717	0.729
		0.855	0.066		0.081	1

表 4 方腔自然对流典型参数计算值与“标准解”之间的偏差百分率

Ra	h	$ \psi_{mid} $	U_{max}	V_{max}	Nu_0
10^3	1/10	0.35	0.56	0.57	0.02
	1/20	0.09	0.05	0.08	0.00
	1/30	0.05	0.03	0.03	0.02
10^4	1/10	0.01	0.65	0.33	4.26
	1/20	0.05	0.04	0.20	0.19
	1/30	0.05	0.02	0.06	0.08
10^5	1/10	0.34	1.46	26.73	8.07
	1/20	1.04	0.71	0.66	4.35
	1/30	1.01	0.10	0.17	0.29

ψ 在方腔中心点的值, u_{\max} 和 v_{\max} 分别为 $x = 0.5$ 和 $y = 0.5$ 线上的最大 u 值和最大 v 值, Nu_o, Nu_{\max} 和 Nu_{\min} 分别为边界 ($x = 0$) 上的平均、最大和最小 Nusselt 数. 表中所列标准 (Benchmark) 解^[48], 由多重网格外推法算出, Ra 数为 $10^3, 10^4$ 和 10^5 时, 标准解各典型参数的百分误差 (%) 不大于 0.1, 0.2 和 0.3. 由表 2~ 表 4 可知 PENS 和 PHD 格式在 Ra 为 10^3 和 10^4 时取步长 $h = 1/20$, Ra 为 10^5 时取 $h = 1/30$ 的较粗网格, 即可达到标准解的计算精度. 又如一维对流扩散反应方程在粗网格 ($\Delta x = 1/20$) 下 PENS 格式给出了最大绝对误差为 10^{-15} 和最大相对误差为 10^{-14} 的极为准确的结果, 而二阶中心和一阶迎风格式的最大相对误差则分别达到 4.86 和 4.45. 网格加密 50 倍 ($\Delta x = 1/1000$), 二阶中心和一阶迎风格式的最大相对误差分别为 10^{-3} 和 10^{-1} , 而所需机时约是 PENS 格式粗网格所需机时的 30 倍 (参见表 1).

6 结束语

摄动有限差分 (PFD) 方法是与多基点和紧致高精度差分方法思路不同的新方法. PFD 方法把微分方程差分离散的概念加以扩充, 既离散微商项也离散非微商项 (包括微商系数), 在维持微商用直接差分 (即二阶中心、一阶前差和后差) 近似, 且一、二和三维分别使用三、五和七个基点的前提下, 把非微商项 (包括微商系数) 摄动展开成步长的幂级数, 并通过消除修正微分方程的截断误差项获得局部线性化微分方程的摄动精确数值解 (PENS) 格式和摄动数值解 (PNS) 格式, 获得非线性近似下的摄动高精度差分 (PHD) 格式.

PENS 格式与已有精确数值解 (ENS) 格式^[19,20,26] 和有限分析 (FA) 格式^[21~26] 性质相同, 这些格式可准确反映对流效应, 又不存在伪数值扩散和负浓度解问题, 对任意大小网格 Reynolds 数一致稳定和收敛, 特别是 PENS 格式不存在已有 ENS 格式和 FA 格式中指数项计算的“数字”溢出问题, 又远比 FA 格式简单、节省机时和存储.

PHD 格式中微商用直接差分或用其他低阶差分近似的同时包含了被摄动量的一阶和二阶导数函数值, 因此 PHD 格式是待求微分方程的非线性近似格式, 在一、二和三维情况下仍分别使用三、五和七个基点.

摄动有限差分 (PFD) 方法是提高差分离散逼近微分方程真解的一种有效方法. 进一步发展可压缩、不可压缩、定常、非定常 Navier-Stokes 方程组的 PFD 方法, 研究 PENS、PNS 和 PHD 格式的稳定性、收敛性、耗散性、色散性和单调性等特性; 检验它们分辨间断、分岔、模拟多尺度三维复杂流动和湍流的能力, 发展其他方程 (例如非线性发展方程) 的 PHD 方法, 研制若干有实用价值的软件等都是值得进一步研究的课题.

参 考 文 献

- 1 Leonard B P. A stable and accurate convection modeling procedure based on quadratic upstream interpolation. *Comput Meth Appl Mech Engn*, 1979, 19: 59~98
- 2 Leonard B P. A survey of finite differences with upwind for numerical modeling of the incompressible convective diffusion equation. In: Taylor C, Mowgou K, ed. *Computational Techniques in Transient and Turbulent Flow*. Pineridge Press, 1981, 1~35
- 3 Han T, Humphery J A C, Lauder B E. A comparison of hybrid and quadratic upstream difference in high Reynolds number elliptic flows. *Comput Meth Appl Mech Engn*, 1981, 29: 81~95
- 4 Rogers S E, Kwak D. Upwind differencing scheme for the time-accurate incompressible Navier-Stokes equations. *AIAA Jour*, 1990, 28(2): 253~262
- 5 Harten A. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *Jour Comput Phys*, 1983, 49: 357~393
- 6 Roe P L. Some Contributions to the modeling of discontinuous flows. *Lectures in Applied Mathematics*, 1985, 22, 163~201
- 7 Harten A, Engquist B, Osher S, Chakravarthy S. Uniformly high-order accurate essentially non-oscillatory schemes III. *Jour Comput Phys*, 1987, 71: 231~303
- 8 Jiang G S, Shu C W. Efficient implementation of weighted ENO schemes. *Jour Comput Phys*, 1996, 126: 202~228

- 9 张涵信. 无波动、无自由参数的耗散性的差分格式. *空气动力学学报*, 1998 (2): 143~164
- 10 Wu H M. MmB—a new class accurate higher resolution scheme in two dimensions—analysis and applications. In: Proc of Third International Symposium on CFD, Nagoya, 1990. 64~72
- 11 Dennis S C R, Hudson J D. An exponential high-order accurate finite difference scheme for the convection-diffusion equation. *Jour Comput Phys*, 1989, 85(2): 390~412
- 12 Lele S K. Compact finite difference scheme with spectral-like resolution. *Jour Comput Phys*, 1992, 103: 16~42
- 13 Fu D X, Ma Y W. A high order accurate difference scheme for complex flow field. *Jour Comput Phys*, 1997, 134: 1~15
- 14 Deng X G et al. A class of high order dissipative compact difference schemes. In: 27th AIAA Fluid Dynamics Conference, New Orleans. AIAA paper, 96-1972, 1995
- 15 汤华中, 邬华谟. 双曲型守恒率的显式紧致差分格式. 见: 北京计算流体力学讨论会文集 (第九辑), 1998. 122~126
- 16 Mark H C et al. The stability of numerical boundary treatments for compact high-order finite-difference schemes. *Jour Comput Phys*, 1993, 108: 272~295
- 17 刘秋生, 沈孟育, 刘华. 求解常微分边值问题的新数值方法. *清华大学学报*, 1996, 36: 7~12
- 18 沈孟育. 高精度、高分辨率差分格式研究进展. In: Proc of ISFMA Symposium on Computational Aerodynamics, Sept 1999, Xi'an, China, 1999
- 19 苏铭德. 高等计算流体力学——第二部分: 新型差分格式. 初稿, 1998
- 20 Roache P. Computational Fluid Dynamics. Hermosa Press, 1974
- 21 Patanker S V. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. McGraw-Hill Book Company, 1984
- 22 Chen C J et al. Finite analytic numerical solution of heat transfer in two dimensional cavity flow. *Numerical Heat Transfer*, 1981, 4, 179~197
- 23 Chen C J. Finite analytic numerical solution of axisymmetric Navier-Stokes and energy equations. *Jour of Heat Transfer*, 1983, 52: 201~222
- 24 Chen C J, Chen H C. Development of finite analytic numerical solution method for unsteady two-dimensional convection transfer equations. *Jour Comput Phys*, 1983, 49: 401~423
- 25 陈景仁. 湍流模型及有限分析方法. 上海: 上海交通大学出版社, 1998
- 26 吴江航, 韩庆书. 计算流体力学的理论、方法及应用. 北京: 科学出版社, 1988
- 27 Chen G Q, Yang Z F. A perturbational high order accurate difference scheme for convective diffusion equation. *Jour of Hydrodynamics*, Ser B, 1993, 5(1): 82~97
- 28 Gao Z. An infinite-order accurate upwind compact difference scheme for the convective diffusion equation. In: Proc of Asia Workshop on Computational Fluid Dynamics. Sept, 1994, Sichuan, China
- 29 高智. 对流扩散方程的高精度差分算法. 见: 北京计算流体力学讨论会文集 (第六辑). 1994. 1~23
- 30 高智. 摄动差分方法. 见: 第二届海峡两岸计算流体力学学术讨论会文集. 绵阳, 1999. 31~38
- 31 高智. 摄动精确数值解方法. 北京计算流体力学讨论会文集, 第 11 辑. 待发表
- 32 高智, 胡利民, 申义庆. 对流扩散反应方程的摄动精确数值解方法. 待发表
- 33 Gao Z, Zhang D L. A perturbational fourth order accurate upwind compact difference scheme for convective diffusion equation. *Jour Comput Phys*, to be submitted
- 34 陈国谦, 高智. 对流扩散方程的四阶紧致迎风差分格式. *计算数学*, 1992, 104(1): 129~139
- 35 Chen G Q, Gao Z, Yang Z F. A perturbational h^4 exponential difference scheme for convective diffusion equation. *Jour Comput Phys*, 1993, 104(1): 129~139
- 36 陈国谦, 杨志峰, 高智. 对流扩散方程的紧致高精度差分格式. *计算物理*, 1991, 8(4): 359~372
- 37 陈国谦, 杨志峰. 对流扩散方程的指数型摄动差分方法. *计算物理*, 1993, 10(2): 197~207
- 38 陈国谦, 杨志峰. 对流扩散方程的二阶紧致迎风差分格式. *水动力学研究与进展 (A 辑)*, 1993, 8(增刊): 499~507
- 39 陈国谦, 高智. 对流扩散方程的迎风数学变换和差分格式. *力学学报*, 1991, 23(5): 418~425
- 40 Ferziger J H, Peric M. Computational Methods for Fluid Dynamics. Spring, 1996
- 41 Hemker P W. A numerical Study of Stiff Two-Point Boundary Problems. Amsterdam: Mathematisch Centrum, 1997
- 42 Rivas E K. On the use of nonuniform grids in finite difference equations. *Jour Comput Phys*, 1972, 10: 202~210
- 43 忻孝康等. 定常对流扩散方程的修正积分因子方法. *水动力学研究与进展 (A 辑)*, 1993, 8(3): 285~295
- 44 忻孝康, 刘儒, 蒋伯初. 计算流体力学. 长沙: 国防科技大学出版社, 1989
- 45 陶文铨. 数值传热学. 西安: 西安交通大学出版社, 1995
- 46 Aziz A, Na T Y. Perturbation Methods in Heat Transfer. London: Hemisphere Publishing Co, 1984
- 47 Bush A W. Perturbation Methods for Engineers and Scientists. Boca Raton: CRC Press, 1992

附录

对流扩散方程摄动精确数值解 (PENS) 格式的 TVD 性质

非定常一维对流扩散方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + A \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \tag{A.1}$$

的半离散化摄动精确数值解 (PENS) 格式为

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_j}{\partial t} = \frac{1}{\Delta x^2} & \left[\left(1 - \frac{1-\alpha}{2} A_p \Delta x\right) u_{j+1} - (2 + \alpha A_p \Delta x) u_j + \left(1 + \frac{1+\alpha}{2} A_p \Delta x\right) u_{j-1} \right] = \\ & \frac{1}{2\Delta x^2} \{ [1 + \alpha + (1-\alpha)e^{-A\Delta x}] u_{j+1} - 2(1 + \cosh A\Delta x + \alpha \sinh A\Delta x) u_j + \\ & [1 - \alpha + (1+\alpha)e^{A\Delta x}] u_{j-1} \} = \frac{1}{2\Delta x^2} (c_{j+\frac{1}{2}}^+ \Delta_{j+\frac{1}{2}} u - c_{j-\frac{1}{2}}^- \Delta_{j-\frac{1}{2}} u) \end{aligned} \tag{A.2}$$

其中

$$\begin{aligned} \Delta_{j+\frac{1}{2}} u &= u_{j+1} - u_j, \quad \Delta_{j-\frac{1}{2}} u = u_j - u_{j-1}, \quad \alpha = \text{sign}(A\Delta x) \\ c_{j+\frac{1}{2}}^+ &= 1 + \alpha + (1-\alpha)e^{-A\Delta x}, \quad c_{j-\frac{1}{2}}^- = 1 - \alpha + (1+\alpha)e^{A\Delta x} \end{aligned}$$

由于 $\alpha = \text{sign}(A\Delta x)$, 所以 $c_{j\pm\frac{1}{2}}^\pm > 0$; 若令 $\alpha = 0$, 即对原始格式为中心差分格式的情况, 仍有 $c_{j\pm\frac{1}{2}}^\pm > 0$. 总变差为

$$TV(u) = \sum_{-\infty}^{\infty} |u_{j+1} - u_j| = \sum_{-\infty}^{\infty} S_{j+\frac{1}{2}} (u_{j+1} - u_j) \tag{A.3}$$

其中

$$\begin{aligned} S_{j+\frac{1}{2}} &= \begin{cases} 1, & \Delta_{j+\frac{1}{2}} u \geq 0 \\ -1, & \Delta_{j+\frac{1}{2}} u < 0 \end{cases} \\ \frac{d}{dt}[TV(u)] &= \sum_{-\infty}^{\infty} S_{j+\frac{1}{2}} \frac{d}{dt}(u_{j+1} - u_j) = \\ & \frac{1}{2\Delta x^2} \sum_{-\infty}^{\infty} S_{j+\frac{1}{2}} \{ C_{j+\frac{3}{2}}^+ \Delta_{j+\frac{3}{2}} u - C_{j+\frac{1}{2}}^- \Delta_{j+\frac{1}{2}} u - C_{j+\frac{1}{2}}^+ \Delta_{j+\frac{1}{2}} u + C_{j-\frac{1}{2}}^- \Delta_{j-\frac{1}{2}} u \} = \\ & - \frac{1}{2\Delta x^2} \sum_{-\infty}^{\infty} V_{j+\frac{1}{2}} \Delta_{j+\frac{1}{2}} u \end{aligned} \tag{A.4}$$

其中

$$S_{j+\frac{1}{2}} = (C_{j+\frac{1}{2}}^+ + C_{j+\frac{1}{2}}^-) S_{j+\frac{1}{2}} - C_{j+\frac{1}{2}}^+ S_{j-\frac{1}{2}} - C_{j+\frac{1}{2}}^- S_{j+\frac{3}{2}}$$

若 $C_{j+\frac{1}{2}}^\pm \geq 0$, 则 $V_{j+\frac{1}{2}}$ 或为零, 或与 $\Delta_{j+\frac{1}{2}} u$ 同符号, 所以

$$\frac{d}{dt}[TV(u)] \leq 0 \tag{A.5}$$

即对流扩散方程 (A.1) 的摄动精确数值解 (PENS) 格式对任意大小的 $A\Delta x$ 均具有 TVD 性质.

ADVANCES IN PERTURBATION FINITE DIFFERENCE (PFD) METHOD

Gao Zhi

Laboratory of High Temperature Gas Dynamics, Institute of Mechanics,
Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China

Abstract In the perturbation finite difference (PFD) method both the differentials and non-differential terms in the differential equation studied are discretized. High accuracy and high resolution difference schemes are obtained with the differentials being approximated by the direct differences (i.e., second-order-accurate center difference and first-order-accurate upwind difference). PFD method includes the perturbation exact numerical solution (PENS) scheme for locally linearized differential equation and the perturbation high-order-accurate difference (PHD) schemes with nonlinear effects. The basic idea and concrete technique of PFD method and some PENS-, PNS- and PHD- schemes for some differential equations including the convective-diffusion equation, convective-diffusion-reaction equation, hyperbolic equation, parabolic equation and KdV equation are summarized. The properties and typical numerical results of the above-mentioned schemes are discussed, comparisons of PFD method with the other related numerical methods are made and some subjects for further studies are presented.

Keywords finite difference method, perturbation finite difference method, perturbation exact numerical solution scheme, perturbation high-order-accurate difference scheme