

摄动有限差分方法及其应用

张德良 胡宗民

(中国科学院力学研究所, 北京 100080)

摘要: 微分方程差分近似中的数值摄动思想和摄动有限差分(PFD)方法是微分方程差分近似高精度化的一条全新思路^[1-4]。本文简要介绍 PFD 方法的基本思想和特点,并以不可压和可压缩流动的算例,来说明 PFD 格式结构形式简洁、精度高、省机时、效率好的优良特点^[1-11]。摄动有限差分 PFD 方法的出现为我们精确模拟流体力学的复杂流场开辟了一条全新的途径。深入研究 PFD 方法在流体力学中的应用,编制以 PFD 为基础的软件,将为计算流体力学的发展打开全新的局面。

1. 引言

在流体力学问题的差分计算中,对导数的差分近似、最简单和最基本的是直接差分近似(例如:一阶迎风和二阶中心差分)。计算实践表明,在网格雷诺数大于 2 时,中心差分格式会发生数值振荡,而一阶迎风格式虽然避免了数值振荡,但数值扩散超过了物理扩散,精度太低。因此,人们一直致力于发展高阶精度格式。主要的高精度差分格式如:显式多基点高精度格式、隐式紧致(Compact)高精度格式、利用对流系数导数的紧致高精度格式、时空守恒格式等。微分方程差分近似中的数值摄动思想和摄动有限差分(PFD)方法是中科院力学所的高智提出出来的一种新型高精度格式^[1-4],并且在实践中高智和他的合作者、学生把摄动有限差分(PFD)方法得到了初步的应用^[1-11]。

在显式多基点高精度格式^[12-13]中未知量为待求函数,它通过增加基点数目来提高格式精度,这是最基本的一种高精度方法,二阶迎风格式、三阶 Quick 格式、TVD、NND、ENO、NND 格式均属此类。多基点会给边界点及边界附近的处理³带来困难,且使系数矩阵带宽加大、运算量加大。

在隐式紧致(Compact)高精度格式^[14]中,待求函数和待求函数的各阶导数均被取作未知量,因此紧致格式可使用较少的基点数达到高的精度。紧致格式突出优点是精度高,而使用的基点数少,但边界处理有困难。因此在边界附近紧致格式需降阶。更值得注意的是,紧致格式把待求函数的各阶导数也取作未知量、待求解的方程会改变性质且需要“设置”比物理边界条件更多的边界条件,因而难以弄清它代表的是什么物理问题。作为数值近似,需要证明它在什么条件下才能收敛到待求解的物理问题。

在利用对流系数导数的紧致格式^[15-17]中,未知量仍取待求函数,该格式不增加基点数也不利用待求函数的导数,但通过使用对流系数的一、二阶导数获得高精度格式(四阶),因而它为显式格式且不存在隐式紧致格式上述物理基础不清楚的缺陷。但它的应用对象局限于对流扩散方程。

时空守恒(CE/SE)方法^[18-19]与传统算法不同,它将时间和空间同等对待,并从守恒型积分方程出发,通过设立守恒元和解元使格式满足局部和全局守恒律,且取函数及其对空间的偏导数为未知量。该法具有结构简单、通用性好和计算精度高的优点。

摄动有限差分(PFD)方法与多基点方法和紧致方法不同,与时空守恒方法也不同,它利用微

分方程以及差分格式修正微分方程本身的性质获得高精度差分格式，这是微分方程差分近似高精度化的另一条全新思路。本文简述摄动有限差分(PFD)方法的基本思想和特点，并以二维不可压 NS 方程组、一维 Euler 方程组的 PFD 格式及相应的数值结果为例加以说明。最后简要讨论摄动有限差分方法在计算流体力学中的应用问题和可能发展。

2. 摄动有限差分(PFD)方法的基本思想和特点

摄动有限差分(PFD)方法的基本思想是在流体动力学诸方程(如对流扩散型方程、一阶双曲型方程)中，导数项用直接差分(指一阶迎风和二阶中心差分)近似，在维持直接差分基点数不变的前提下，把非导数项(包括导数项系数和源项)，视作数值并摄动展开成步长的幂级数，幂级数的系数通过消除摄动格式修正微分方程的截断误差项求出，由此获得守恒型和非守恒对流扩散方程、一阶双曲型方程、NS 方程、Euler 方程、对流扩散反应方程、二阶双曲型和抛物型方程等的高精度摄动有限差分(PFD)格式^[1-11]。

摄动有限差分(PFD)方法的特点是：

1. 摄动有限差分(PFD)格式为显式格式；
2. 格式均具有一阶迎风格式的简洁结构形式和迎风性，保证数值解收敛于原方程；
3. 格式需要较少的基点。在一、二和三维情况下分别仅使用三、五和七个基点。
4. 格式对强弱间断、物理振荡、对漩涡和薄粘性层结构等、具有较高的精度和分辨率。
5. PFD 格式所需机时约为一阶迎风格式所需机时的 1/4—1/10。
6. 格式在对导数的差分近似与推导微分方程时对导数的定义是完全一致的，要求的边界条件与原微分方程的物理边界条件也是完全一致的。
7. 对于对流扩散方程、二阶双曲型方程和对流扩散反应等方程，PFD 格式可获得离散单元局部线性化方程的准确数值解，即摄动精确数值解 (PENS) 格式。

总之，摄动有限差分(PFD)方法、多基点方法、紧致方法和时空守恒方法四者的特点不同，高精度化的思路也不同，参见示意图 1。摄动有限差分(PFD)方法是一种完全新型的数值方法，初步的计算实践表明它的计算精度高、分辨率高、省机时、计算效率好的相当成功的数值方法，值得引起人们关注。

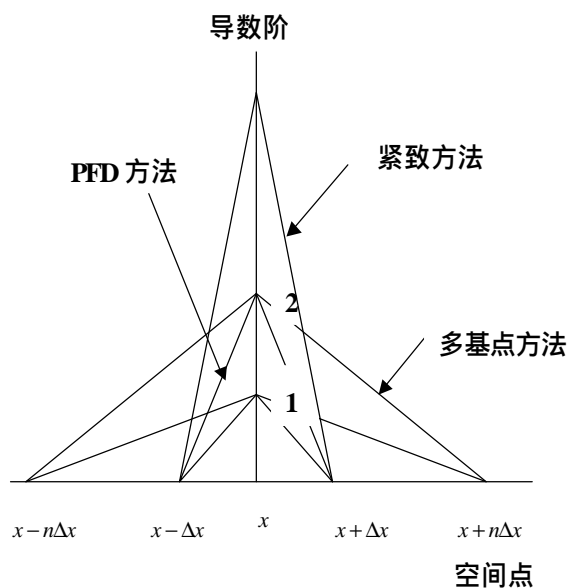
3 对流扩散型方程的摄动有限差分(PFD)格式和摄动精确数值解(PENS)格式^[1-6, 11]

非守恒对流扩散方程和一阶双曲型方程可统一写成：

$$\frac{\partial u}{\partial t} + A \frac{\partial u}{\partial x} = n \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (3.1)$$

$n \neq 0$ 为对流扩散方程， $n = 0$ 和 $A = u$ 为一阶双曲型方程。方程(3.1)的半离散一阶迎风差分格式为

图 1 流体运动方程差分近似诸方法示意



$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{\Delta x^2} \left[\left(n - \frac{1-a}{2} A \Delta x \right) u_{i+1} - (2n + a A \Delta x) u_i + \left(n + \frac{1+a}{2} A \Delta x \right) u_{i-1} \right] \quad (3.2)$$

其中 $a = \text{sign} A$ ，今把对流系数 A 摄动展开成 Δx 的幂级数，

$$A_p = A + \sum_{n=1}^{\infty} A_n \Delta x^n \quad (3.3)$$

半离散的摄动格式为

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{\Delta x^2} \left[\left(n - \frac{1-a}{2} A_p \Delta x \right) u_{i+1} - (2n + a A_p \Delta x) u_i + \left(n + \frac{1+a}{2} A_p \Delta x \right) u_{i-1} \right] \quad (3.4)$$

摄动格式(3.4)的修正微分方程为

$$\frac{\partial u}{\partial t} + A \frac{\partial u}{\partial x} - n \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{a A_p}{(2n)!} \frac{\partial^{2n} u}{\partial x^{2n}} \Delta x^{2n-1} + \sum_{n=1}^{\infty} \left[-\frac{A_p}{(2n+1)!} \frac{\partial^{2n+1} u}{\partial x^{2n+1}} + \frac{2n}{(2n+2)!} \frac{\partial^{2n+2} u}{\partial x^{2n+2}} \right] \Delta x^{2n} \quad (3.5)$$

修正微分方程(3.5)中，令右端截断误差项 $x^n (n=1, 2, \dots, N)$ 的系数等于零，可获得确定 $A_n (n=1, 2, \dots, N)$ 的 N 个关系式，这 N 个关系式前几个为

$$A_1 \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{a}{2!} A \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (3.6.1)$$

$$A_2 \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{a}{2!} A_1 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{A}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \frac{2n}{4!} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \quad (3.6.2)$$

$$A_3 \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{a}{2!} A_2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{A_1}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \frac{a A}{4!} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \quad (3.6.3)$$

$$A_4 \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{a}{2!} A_3 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{A_2}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \frac{a A_1}{4!} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - \frac{A}{5!} \frac{\partial^5 u}{\partial x^5} + \frac{2n}{6!} \frac{\partial^6 u}{\partial x^6} \quad (3.6.4)$$

由(3.6)诸式求得 A_1, A_2, \dots, A_N 后，(PFD)格式(3.4)的空间精度达到 $(N+1)$ 阶， $N \rightarrow \infty$ 得到摄动精确数值解(PENS)格式。 $n \neq 0$ 时，方程(3.1)的一阶和二阶空间导数满足关系

$$A \frac{\partial u}{\partial x} = n \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (3.7)$$

由式(3.7)推知

$$\frac{\partial^{N+1} u}{\partial x^{N+1}} = \frac{A^N}{n^N} \frac{\partial u}{\partial x} \quad (N \geq 1) \quad (3.8)$$

$$A_N = \frac{a^N}{(N+1)!} \frac{A^{N+1}}{i^N} \quad (N \geq 1) \quad (3.9)$$

把式(3.9)代入格式(3.4)，得到空间精度为二阶和四阶的半离散 PFD 格式为

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{n}{\Delta x^2} \left\{ \left[1 - \frac{1-a}{2} (R_{\Delta x} - \frac{1}{2} R_{\Delta x}^2) \right] u_{i+1} - (2 + a R_{\Delta x} + \frac{1}{2} R_{\Delta x}^2) u_i + \left[1 + \frac{1+a}{2} (R_{\Delta x} + \frac{1}{2} R_{\Delta x}^2) \right] u_{i-1} \right\} \quad (3.10.1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{n}{\Delta x} & \left\{ \left[1 - \frac{1-a}{2} (R_{\Delta x} - \frac{1}{2} R_{\Delta x}^2 + \frac{1}{6} R_{\Delta x}^3 - \frac{1}{24} R_{\Delta x}^4) \right] u_{i+1} - (2 + a R_{\Delta x} + \frac{1}{2} R_{\Delta x}^2 \right. \\ & \left. + \frac{a}{6} R_{\Delta x}^3 + \frac{1}{24} R_{\Delta x}^4) u_i + \left[1 + \frac{1+a}{2} (R_{\Delta x} + \frac{1}{2} R_{\Delta x}^2 + \frac{1}{6} R_{\Delta x}^3 + \frac{1}{24} R_{\Delta x}^4) \right] u_{i-1} \right\} \end{aligned} \quad (3.10.2)$$

其中 $R_{\Delta x} = \frac{A \Delta x}{n}$ ；在式(3.9)中令 $N \rightarrow \infty$ ，得到空间精度为无穷阶精度、即定常 $\frac{\partial u}{\partial t} = 0$ 对流扩散方程的精确数值解。于是得到半离散摄动精确数值解(PENS)格式，

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{n}{2\Delta x^2} \{ [1 + a + (1 - a)e^{-R_{\Delta x}}] u_{i+1} - 2(1 + \cosh R_{\Delta x} + a \sinh R_{\Delta x}) u_i + [1 - a + (1 + a)e^{R_{\Delta x}}] u_{i-1} \} \quad (3.11)$$

对半离散 PFD 格式(3.10)和半离散 PENS 格式(3.11)的空间离散部分, 即对定常问题作如下的简要讨论:

i) 与多基点高阶迎风格式相比, 二阶和四阶 PFD 格式以及无穷阶精度 PENS 格式均仅使用三个基点; ii) 二阶 PFD 格式即使在 $a = 0$ 时均不会出现经典二阶中心格式的数值振荡, 事实上, PFD 格式(3.10)、PENS 格式(3.11)、经典一阶迎风格式和二阶中心格式的半离散形式可以统一地写成

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{n}{2\Delta x^2} [au_{i+1} - (a+b)u_i + bu_{i-1}] \quad (3.12.1)$$

半离散格式定常问题的通解为

$$u_i = c_1 + c_2 r^i = c_1 + c_2 \left(\frac{b}{a}\right)^i \quad (3.12.1)$$

由半离散格式(3.10)可知, 在迎风 PFD 格式、二阶和四阶中心 PFD 格式(3.10)以及 PENS(3.11)格式中, $a > 0$ 和 $b > 0$ 恒成立。因此无论是迎风还是中心($=0$)型二阶和四阶 PFD 格式, 无论是迎风还是中心($=0$)型 PENS 格式均绝对稳定, 具有 TVD 性质, 参见表 1, 不会出现经典二阶中心差分在 $R_x = 2$ 时的数值振荡。iii) 定常 PENS 格式(3.11)的解就是对流扩散方程(3.1)的定常线化问题的精确解, 事实上我们固定 $x_i = x$, 考察通解(3.12.1)中 r^i 在 $\Delta x \rightarrow 0$ 时的极限, 由于

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \ln r^i = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{x_i}{\Delta x} \ln \frac{1 - a + (1 + a) \exp(R_{\Delta x})}{1 + a + (1 - a) \exp(-R_{\Delta x})} = Ax_i \quad (3.13.1)$$

因此, $\lim_{\substack{x_i \text{ 固定} \\ \Delta x \rightarrow 0}} r^i = \exp(Ax_i) \quad (3.13.2)$

即 PENS 格式(3.11)的解 r^i 是方程(3.1)定常线化问题的基本解。上述事实说明摄动有限差分(PFD)方法是一种精确的数值解析法, 即把解析方法引入了差分格式之中。iv) 在 PENS 格式(3.11)中对 $\exp(-R_x)$ 和 $\exp(R_x)$ 取 Taylor 展开, 保留到 R_x^2 和 R_x^4 分别得到二阶和四阶 PFD 格式(3.10)。

把摄动有限差分思想用于 NS 方程组, 不难获得 NS 方程组的摄动有限差分(PFD)格式, 今以二维不可压缩 NS 方程组为例加以说明。二维不可压 NS 方程组为

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (3.14.1)$$

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \mathbf{n} \left(\frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial y^2} \right) \quad (3.14.2)$$

在推导 NS 方程(3.47)的半离散 PFD 格式时, 把压力梯度取作源项、并用一阶前差近似, 连续性方程则用中心差分近似。于是 NS 方程组(3.47)的半离散 PFD 格式为

$$\frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j+1} - v_{i,j-1}}{\Delta y} = 0 \quad (3.15.1)$$

表 1. 对流扩散方程七种差分格式比较

格式	守恒性	稳定性	基点数
二阶中心格式	有	条件稳定 $R_x = 2$	3
一阶迎风格式	有	绝对稳定	3
二阶迎风格式	无	绝对稳定	5
三阶迎风格式 (Quick 格式)	无	绝对稳定	5
二阶 PFD 格式	有	绝对稳定	3
四阶 PFD 格式	有	绝对稳定	3
PENS 格式	有	绝对稳定	3

注: 守恒性指满足关系式 $(u_i)_e = (u_{i+1})_w$, $\left(\frac{\partial u_i}{\partial x}\right)_e = \left(\frac{\partial u_{i+1}}{\partial x}\right)_w$, 下标 e 和 w 表示左右端。

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\mathbf{n}u_{ij}}{u_{p_{ij}}\Delta x^2} & \left[\left(1 - \frac{1-\mathbf{a}_1}{2} u_{p_{ij}}\Delta x\right) u_{i+1,j} - (2 + \mathbf{a}_1 u_{p_{ij}}\Delta x) u_{ij} + \left(1 + \frac{1+\mathbf{a}_1}{2} u_{p_{ij}}\Delta x\right) u_{i-1,j} \right] \\ & + \frac{\mathbf{m}v_{ij}}{v_{p_{ij}}\Delta y^2} \left[\left(1 - \frac{1-\mathbf{a}_2}{2} v_{p_{ij}}\Delta y\right) u_{i,j+1} - (2 + \mathbf{a}_2 v_{p_{ij}}\Delta y) u_{ij} + \left(1 + \frac{1+\mathbf{a}_2}{2} v_{p_{ij}}\Delta y\right) u_{i,j-1} \right] + \frac{P_{i+1,j} - P_{ij}}{\Delta x} = 0 \end{aligned} \quad (3.15.2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\mathbf{m}v_{ij}}{u_{p_{ij}}\Delta x^2} & \left[\left(1 - \frac{1-\mathbf{a}_1}{2} u_{p_{ij}}\Delta x\right) v_{i+1,j} - (2 + \mathbf{a}_1 u_{p_{ij}}\Delta x) v_{ij} + \left(1 + \frac{1+\mathbf{a}_1}{2} u_{p_{ij}}\Delta x\right) v_{i-1,j} \right] \\ & + \frac{\mathbf{m}v_{ij}}{v_{p_{ij}}\Delta y^2} \left[\left(1 - \frac{1-\mathbf{a}_2}{2} v_{p_{ij}}\Delta y\right) v_{i,j+1} - (2 + \mathbf{a}_2 v_{p_{ij}}\Delta y) v_{ij} + \left(1 + \frac{1+\mathbf{a}_2}{2} v_{p_{ij}}\Delta y\right) v_{i,j-1} \right] + \frac{P_{i,j+1} - P_{ij}}{\Delta y} = 0 \end{aligned} \quad (3.15.3)$$

其中 $u_{p_{ij}}\Delta x \cong R_{\Delta x,ij} + \frac{\mathbf{a}_1}{2} R_{\Delta x,ij}^2$ (二阶); $R_{\Delta x,ij} + \frac{\mathbf{a}_1}{2} R_{\Delta x,ij}^2 + \frac{1}{3!} R_{\Delta x,ij}^3 + \frac{\mathbf{a}_1}{4!} R_{\Delta x,ij}^4$ (四阶)

$v_{p_{ij}}\Delta x \cong R_{\Delta y,ij} + \frac{\mathbf{a}_2}{2} R_{\Delta y,ij}^2$ (二阶); $R_{\Delta y,ij} + \frac{\mathbf{a}_2}{2} R_{\Delta y,ij}^2 + \frac{1}{3!} R_{\Delta y,ij}^3 + \frac{\mathbf{a}_2}{4!} R_{\Delta y,ij}^4$ (四阶) (3.16)

$R_{\Delta x,ij} = \frac{u_{ij}}{\mathbf{n}_{ij}} \Delta x$, $R_{\Delta y,ij} = \frac{v_{ij}}{\mathbf{n}_{ij}} \Delta y$, $\mathbf{a}_1 = \text{sign}(R_{\Delta x,ij})$, $\mathbf{a}_2 = \text{sign}(R_{\Delta y,ij})$ 。

不可压缩三维 NS 方程组以及可压缩 NS 方程组的 PFD 格式, 可用类似方法构造。

4 一阶双曲方程组的摄动有限差分 (PFD) 格式^[7, 8, 11]

考虑一阶双曲方程组

$$\frac{\partial U}{\partial t} + A \frac{\partial U}{\partial x} = 0 \quad (4.1)$$

其中 $U = (u_1, u_2, \dots, u_n)^T$ 为 n 维向量。假设

$$A = S^{-1} \Lambda S \quad (4.2.1)$$

$$\Lambda = \text{diag}(\mathbf{I}_1, \mathbf{I}_2, \dots, \mathbf{I}_n), \quad S = (S_1, S_2, \dots, S_n)^T \quad (4.2.2)$$

Λ 和 S 分别是 A 的特征值矩阵和左特征向量矩阵。于是方程组的半离散一阶迎风格式即为

$$\frac{\partial U}{\partial t} + S^{-1} \frac{\Lambda}{2} [I + \text{sgn}(\Lambda)] S \frac{U_i - U_{i-1}}{\Delta x} + S^{-1} \frac{\Lambda}{2} [I - \text{sgn}(\Lambda)] S \frac{U_{i+1} - U_i}{\Delta x} = 0 \quad (4.3)$$

其中 I 为单位矩阵, $\text{sgn}(\Lambda) = \text{diag}(\text{sgn} \mathbf{I}_1, \text{sgn} \mathbf{I}_2, \dots, \text{sgn} \mathbf{I}_n)$ 。今把格式(4.3)中的 Λ 按空间

$$\text{步长摄动展开为 } \Lambda_p = \Lambda + \sum \Lambda_n \Delta x^n \quad (4.4)$$

其中 $\Lambda_p = \text{diag}(\mathbf{I}_{n1}, \mathbf{I}_{n2}, \dots, \mathbf{I}_{nn})$, 为对角矩阵。把 Λ_p 代入格式(3.52)得到半离散 PFD 格式

$$\frac{\partial U}{\partial t} + S^{-1} \frac{\Lambda_p}{2} [I + \text{sgn}(\Lambda)] S \frac{U_i - U_{i-1}}{\Delta x} + S^{-1} \frac{\Lambda_p}{2} [I - \text{sgn}(\Lambda)] S \frac{U_{i+1} - U_i}{\Delta x} = 0 \quad (4.5)$$

PFD 格式(4.5)的修正微分方程组为

$$\frac{\partial U}{\partial t} + S^{-1} \Lambda_p S \frac{\partial U}{\partial x} = \sum_{n=1} \frac{1}{(n+1)!} S^{-1} \Lambda_p \text{sgn}(\Lambda) S \frac{\partial^{n+1} U}{\partial x^{n+1}} \Delta x^n \quad (4.6)$$

因此只要如下诸式成立

$$S^{-1} \Lambda_1 S \frac{\partial U}{\partial x} = \frac{1}{2} S^{-1} \Lambda \text{sgn}(\Lambda) S \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \quad (4.7.1)$$

$$S^{-1} \Lambda_2 S \frac{\partial U}{\partial x} = \frac{1}{3!} S^{-1} \Lambda \text{sgn}(\Lambda) S \frac{\partial^3 U}{\partial x^3} + \frac{1}{2} S^{-1} \Lambda_1 \text{sgn}(\Lambda) S \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \quad (4.7.2)$$

则半离散 PFD 格式的空间精度达到 2 阶和 3 阶。对式(4.7)中的 $\partial^2 u / \partial x^2$, 我们取

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \Big|_i = \frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{\Delta x^2} \quad (4.8.1)$$

对 $S \frac{\partial U}{\partial x}$ ，书写方便起见将 $S \frac{\partial U}{\partial x}$ 的第 j 个分量记作 $S_j \frac{\partial U}{\partial x}$ ，并取

$$(S \frac{\partial U}{\partial x})_i = \begin{cases} S_j \frac{U_i - U_{i-1}}{\Delta x} & |S_j(U_i - U_{i-1})| \geq |S_j(U_{i+1} - U_i)| \\ S_j \frac{U_{i+1} - U_i}{\Delta x} & \text{其它} \end{cases} \quad (4.8.2)$$

其中 $j=1,2,\dots,n$ 。 S_i 表示矩阵 S 的第 j 个行向量在基点 i 处取值，并有

$$\Lambda_{i,j} = \begin{cases} \frac{1}{2} I_j \operatorname{sgn}(I_j) S \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \Big|_i & \text{若 } [S_j \frac{\partial U}{\partial x}]_i \neq 0 \\ [S_j \frac{\partial U}{\partial x}]_i & \text{其它} \\ 0 & \text{其它} \end{cases} \quad (4.9)$$

通过类似的运算，不难得到守恒型一阶双曲方程组的半离散高精度 PFD 格式。类似地可以给出非守恒和守恒型 Euler 方程组的半离散高精度 PFD 格式。

5. 摄动有限差分 (PFD) 格式在不可压和可压缩流动的应用^[4-9, 11]

我们利用不可压缩二维 NS 方程组的二阶 PFD 格式计算了绕前台阶流、绕后台阶流和方腔流动，并把二阶 PFD 格式与三阶紧致格式、一阶迎风和二阶迎风格式，二阶中心格式和 SOLA 格式等六种格式、从耗费机时、数值精度、正确反映物理规律和可计算的 Re 数范围等方面做了对比研究，得到如下初步结论(参见表 2-表 4 和图 2 - 图 3)：

- 1) 摄动有限差分格式的格式稳定性好。在同样的计算条件下，它能在 50 到 5000 的雷诺数范围内获得有效的计算结果。而三阶紧致格式在同样的雷诺数范围内能有效收敛，但在 Re 数为 5000 时，大涡发生变形，小涡计算不出。
- 2) 二阶摄动有限差分格式精度高，能很好模拟流场及其变化规律。一阶迎风格式模拟流场精度稍低，但捕捉涡形状也较清晰。三阶紧致格式在 Re 为 100 时壁面左下角的小涡流线出现中断，Re 为 5000 时大涡出现变形。SOLA 格式在低 Re 数范围内能清晰分辨大涡和两边小涡，在 Re 数 1000 时右端小涡形状不合理，计算结果不可信。
- 3) 通过对计算时间的比较，在同样的计算条件下，三阶迎风紧致格式计算速度最快，摄动有限差分方法也较快，迎风格式计算时间稍长，SOLA 格式计算时间约大一个量级。
- 4) 根据粘性应力和 $m \frac{\partial u}{\partial y}$ 成正比的规律，下壁面中心附近切向流速 u 对 y 坐标的导数是反映方腔流动壁面摩擦的参量，它的无量纲形式具有 $Re^{-\frac{1}{2}}$ 的量级，应该随 Re 数增大而单调减小。除紧致格式外，其他几种格式该参量呈现单调下降的趋势，并且数值相近(见表 2)，因此能较准确地反映上述物理规律。而三阶紧致格式的摩擦参量随 Re 数的增加先出现缓慢增加，后又突然下降，与物理规律出现明显差别，说明三阶紧致格式在边界附近存在一定的问题。

文[7, 8, 9]利用非守恒和守恒型 Euler 方程组的 PFD 格式计算了一维激波管流动和二维激波反射问题。可压缩一维非定常守恒性 Euler 方程组为

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{f}}{\partial x} = 0 \quad (5.1)$$

其中 $\vec{u} = (\mathbf{r}, \mathbf{ru}, \mathbf{re})^T$ 、 $\vec{f} = (\mathbf{ru}, \mathbf{ru}^2 + p, (\mathbf{re} + p)\mathbf{u})^T$ 、 $e = \frac{p}{(\mathbf{g}-1)\mathbf{r}} + \frac{u^2}{2}$ ， \mathbf{g} 为比热比

表 2. 各种方法计算时间的比较 (注: 计算在 P 500 上运行, $\Delta t = 0.01$, 网格数 50×50 。

“—”表示在该计算条件下难以得到有效数据, “*”为网格数 100×100 的结果。)

时间(S) \ Re 数	PFD	三阶紧致	一阶迎风	二阶迎风	SOLA 方法
50	18	—	50	—	360
100	40	17	122	75	374
200	75	30	233	107	430
500	144	80	412	173	515
1000	170	130	638	—	1600
3000	95	214	1100*	—	—
5000	86	76	1290*	—	—

表 3 不可压缩方腔流动, 诸格式壁面附近摩阻参数 $\times 10^3$ 随 Re 数变化

(“—”表示在该计算条件下得不到有效数据)

摩阻参数 \ Re 数	PFD	三阶紧致	一阶迎风	二阶迎风	SOLA 方法
100	-1.377	-1.353	-1.396	-1.369	-1.740
200	-1.313	-1.395	-1.384	-1.355	-1.653
500	-1.197	-1.419	-1.373	-1.331	-1.067
1000	-0.953	-1.441	-1.056	—	-0.436
3000	-0.424	-1.057	-0.487	—	-0.377
5000	-0.258	-0.200	-0.366	—	—

表 14. 不可压缩方腔流动, 诸格式各种方法中心最大速度及其与标准结果比较

(“—”表示在该计算条件下难以得到有效数据)

中心最大速度 \ Re 数	PFD	三阶紧致	一阶迎风	二阶迎风	SOLA 方法	标准结果
100	0.20173	0.20159	0.20127	0.20132	0.19712	0.202
200	0.19665	0.19674	0.19670	0.19656	0.19425	0.197
500	0.18135	0.18206	0.18092	0.18199	0.17980	0.183
1000	0.16743	0.17001	0.16854	—	0.16673	0.169

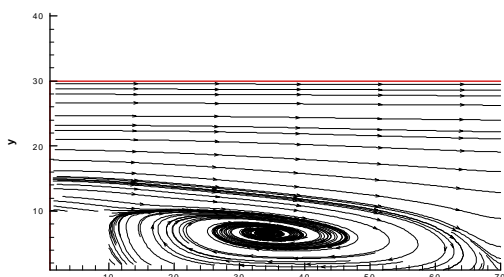


图 2 二维后台阶绕流 PFD 格式算出的流线分布图, Re 数 100, 网格数 30×70

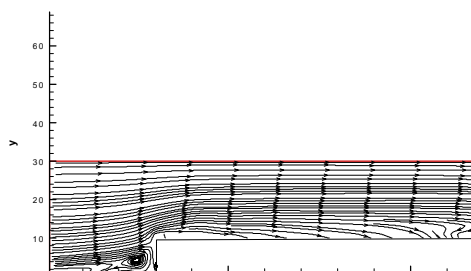


图 3 二维前台阶绕流 PFD 格式算出的流线分布图, Re 数 1000, 网格数 30×120

在构造 Euler 方程组(5.1)的 PFD 格式时,采用了 Steger-Warming 分裂技术。对激波管流动的 Sod 问题^[31]和 Sjogreen 问题^[22]PFD 格式计算简述如下:

对 Sod 问题, $t=0$ 时

$$r_L = 1, p_L = 1, u_L = 0, r_R = 0.125, p_R = 0.1, u_R = 0 \quad (5.2)$$

对 Sjogreen 问题, $t=0$ 时

$$r_L = 1, p_L = 0.4, u_L = -2, r_R = 1, p_R = 0.4, u_R = 2 \quad (5.3)$$

PFD 格式和一阶迎风格式的数值结果参见图 4 - 图 5, 由图可知, 对于分辨激波和膨胀波, PFD 格式的精度明显高于一阶迎风格式, 特别是膨胀波分辨率的提高更为明显。对于超声速膨胀波的计算, 即在 Sjogreen 问题的计算中, 现有的多数高精度格式都出现了计算溢出出现象^[21,22], 而 PFD 格式计算的稳定性和收敛性均属上乘。

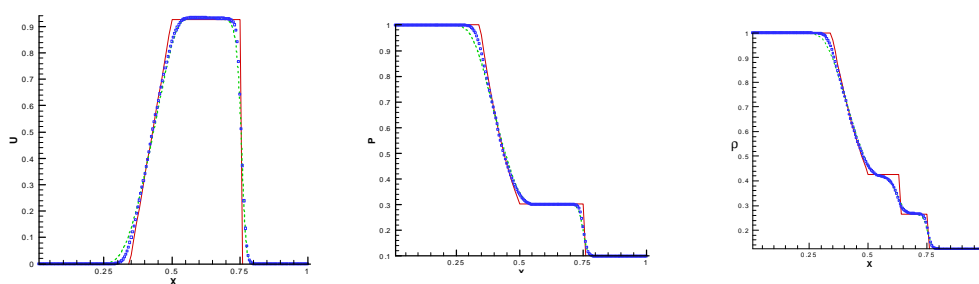


图 4 激波管 Sod 流动速度分布、压力分布、密度分布

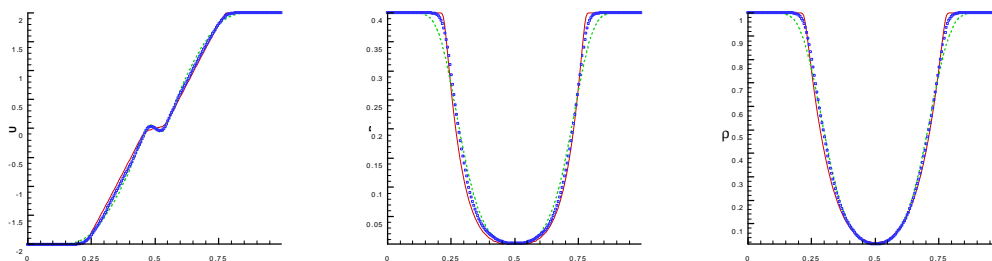


图 5 激波管 Sjogreen 流动速度分布、压力分布、密度分布

6. 摄动有限差分方法在计算流体力学计算中的应用问题和可能发展

综上所述, 我们可以看到摄动有限差分(PFD)方法已经被完整的论述, 并在流体力学的数值模拟中得到初步的应用, 无论是计算精度、稳定性, 还是计算时间方面都具有明显地优势。虽然, 我们对摄动有限差分(PFD)方法的验证和应用, 但是, 我们已经可以看到摄动有限差分(PFD)方法的巨大潜力。最近, 我们又把数值摄动思想用于积分方程的有限体积法中, 提出摄动有限体积 (PFV) 方法^[20], PFV 方法具有与 PFD 方法相类似的优点, 且更适于处理流场几何边界复杂的问题, 因此 PFV 方法在计算流体力学中的发展和应用应该更值得人们关注。

摄动有限差分 PFD 方法的出现为我们精确模拟流体力学的复杂流场开辟了一条全新的途径。PFD 方法具有精度高, 节点少, 算法简单, 节省机时, 计算效率高等优点。深入研究 PFD 方法在流体力学中的应用, 编制以 PFD 为基础的软件, 将为计算流体力学的发展打开新的局面。

参考文献

- [1] Z.Gao "A infinite-order accurate upwind compact difference scheme for the convection diffusion equation" In: Proc. of Asian Workshop on Computational Fluid Dynamics Sept. 1994 Sichuan, China
- [2] 高智 "对流扩散方程的高精度差分算法" 北京计算流体力学讨论会文集(第六辑)1994, pp.1-23
- [3] 高智 "对流扩散方程的摄动有限差分(PFD)方法" 第二届海峡两岸计算流体力学讨论会文集,1999,9 四川绵阳
- [4] 高智 "摄动有限差分方法研究进展" 力学进展 2000,30(2):200-215
- [5] Z.Gao, L.M.Hu "A perturbational exact numerical solution(PENS) scheme for the convection diffusion equation" In: Proc. of 4th Asian Conference on Computational Fluid Dynamics Sept.2000 Mianyang, China
- [6] 朱力立,张德良,高智 "不可压缩NS方程组的摄动有限差分(PFD)格式与应用" 水动力学研究与进展.待发表
- [7] 申义庆,高智,杨顶辉 "双曲守恒型方程的二阶摄动有限差分格式" (空气动力学学报待发表)
- [8] 申义庆,高智,杨顶辉 "一阶双曲方程的摄动有限差分格式" (计算数学待发表)
- [9] 高智,胡利民, "对流扩散方程的摄动精确数值解格式", (水动力学研究与进展待发表)
- [10] 高智,李明军,朱力立 "对流扩散方程变步长摄动有限差分方法与应用" 第十一届全国计算流体力学会议论文, 2002.9
- [11] 高智, "摄动有限差分及其在计算流体力学中的应用", 北京计算流体力学讨论会文集(第十四辑), 2002.5,P1-23
- [12] D.A.Anderson,etal, "Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer", Hemisphere,Mcgraw Hill 1998
- [13] J.H.Ferziger, etal "Computational Methods for Fluid Dynamics" Springer, 1996
- [14] Shen Mengyu, etal "Some advances in study of high order accuracy and high resolution finite difference schemes" In:New Advances in Computational Fluid Dynamics (Ed. By F.Dubois, Wu Huamo) Higher Education Press, 2001
- [15] S.C.R.Dennis, etal J.Comput.Phys. 1989,85,390-405
- [16]]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,
- [17] G.Q.Chen, Z.Gao, Z.F.Yang "A perturbational exponential finite difference scheme for the convection diffusion equation" J.Comput.Phys.1993, 104(1):129-139
- [18] S.C.Chang "The method of space-time conservation element and solution element-A new approach for solving the Navier-Stokes and Euler equations" J.Comput.Phys.1995,119,295-324
- [19] S.C.Chang etal "Fundamentals of CE/SE method" NASA/TM-1998-208843, 1998
- [20] Z.Gao "The perturbational finite difference method — a new approach for solving convective-diffusion equation and Navier-Stokes equaqtion" (to be published)
- [21] G.A.Sod "A survey of several finite difference methods for system of nonlinear hyperbolic conservation laws" ibid, 1978,27:1-31
- [22] B.Einefiat, et "On Godunou-type near law densities" ibid 1991, 92:273-295