

数值摄动算法及其 CFD 格式*

高智†

中国科学院力学研究所高温气体动力学重点实验室, 北京 100190

摘要 数值摄动算法将流体动力学效应耦合进 NS 方程组和对流扩散 (CD) 方程离散的数学基本格式 (MBS), 特别是耦合进最简单的一阶迎风和二阶中心格式之中, 由此构建一系列新的摄动格式 (PS). 构建 PS 的主要步骤是将 MBS 中的通量重构为步长的幂级数, 利用空间分裂和导出的高阶流体动力学线性关系式, 并引入下游不影响上游的对流运动规律, 通过消除重构格式修正微分方程的截断误差诸项求出幂级数的待定系数, 由此获得非线性 PS. PS 的项是 MBS 中对应项与 $R_{\Delta x}$ (及 $\lambda R_{\Delta x}$) 之简单多项式的乘积, $R_{\Delta x}$ 和 λ 分别是网格 Reynolds 数和网格 CFL 数. PS 和 MBS 使用相同结点, 简单性彼此相当, 但 PS 精度高, 稳定范围大, 例如 PS 包含了许多绝对稳定高阶迎风和中心有限差分 (FD) 格式和绝对正型有限体积 (FV) 格式, 这些格式对网格 Reynolds 数的任意值均为不振荡格式. 数值摄动算法因此是构建高精度不振荡 CFD 格式的新方法. PS 用于计算不可压缩流、可压缩流、液滴萃取传质、微通道两相流等, 均获得良好数值结果或与已有 Benchmark 解一致的数值结果. 已有文献称数值摄动算法为新型高精度方法和高算法, 文中也讨论了一些值得进一步研究的课题.

关键词 计算流体力学, 数值摄动算法, 数学基本格式, 摄动差分格式, 摄动有限体积格式

1 引言

计算流体力学 (CFD) 经历了近半个世纪的发展, 取得了巨大的进展, 它的应用已深入到流体力学、数值传热学几乎所有的流体科学和工程技术问题中, 成为力学研究的 3 大手段 (实验、分析和数值模拟) 中的一种 [1~9].

求解 Navier–Stokes (NS) 方程组的离散算法是 CFD 研究的一个核心内容, 近半个世纪以来已提出了大量高精度差分 and 有限体积算法. 已有的离散算法研究主要集中在对流导数的空间离散格式方面. 基本离散格式即数学基本格式 (mathematical basic schemes, MBS), 主要是一阶迎风 (upwind) 格式、二阶中心及其杂交格式 [1~10]; 二阶中心 Lax–Wendroff 格式 [11] 的改进格式 MacCormack 格式 [12] 是 20 世纪 70 年代气动计算所使用的主要方法. 人们也利用数学方法构建了不少精度高于二阶的多结点迎风和中心 MBS, 如 QUICK 格式 [2,6,13]、Fromm 格式 [1,14] 以及结点数达 11 点

的 9 阶迎风和 10 阶中心格式 [15] 等. MBS 在 CFD 商用软件和湍流 DNS (direct numerical simulation) 中得到广泛应用 [6,15,16]; 但是一阶迎风格式数值耗散大 [2], 高阶迎风和中心格式在粗网格下振荡和发散、难以分辨激波和接触间断等流动现象.

因此人们对 MBS 进行重构, 提出和发展了许多高级离散算法和格式, 最主要的高级离散方法是对 MBS 使用通量限制等迎风和人工光滑化方法 [17~51], 还有使用结点导数的隐式紧致方法、气体动力论方法、解元/守恒元、有限谱、改进插值近似的 CIP (cubic interpolated pseudo-particle)、相容守恒和投影格式、使用对流系数导数的摄动差分等方法 [52~90]. 数值摄动法 [91~100] 的思路与上述诸方法不同, 通过解析运算将流体动力学效应进一步耦合进 MBS 中, 构建成高精度摄动格式 (PS). 但是数值摄动法与其他方法依然紧密相关, 其他方法不仅是研究数值摄动法的必要铺垫, 更是进行对比研究的依据和基础, 是进一步改进 PS 的参考和基础. 因此在引言中首先对其他高级离

收稿日期: 2009-12-11, 修回日期: 2010-07-07

* 国家自然科学基金资助项目 (10872204)

† E-mail: gaozhi@imech.ac.cn

散方法作必要的简述。

使用通量限制等迎风的人工光滑化的方法,主要有改进一阶精度 Godunov 间断分解算法^[17]的迎风类格式、通量差分分裂 (flux difference splitting, FDS) 方法^[18,19]、通量矢量分裂 (flux vector splitting, FVS) 方法^[20~22]、分片抛物方法 (piecewise parabolic method, PPM)^[23]、FDS 和 FVS 杂交的对流迎风分裂方法 (advection upstream splitting method, AUSM)^[24,25]。中心类格式主要如 Jameson 等的二阶精度显式有限体积中心格式^[26~28]。为了有效抑制激波附近的数值振荡和非物理解,这些二阶精度格式都使用了对数值耗散或还有数值色散的监控和自适应调节技术。这些高级离散格式在内、外绕流等气动计算中得到了广泛应用,取得了巨大的成功。Harten^[29]提出数值解具有图形锐利和逼真的高分辨率 (high resolution) 概念,包括总变差减小 (total variation diminishing, TVD) 概念和利用通量限制器 (flux limiter) 构建 TVD 格式的思想,为有限差分方法的理论和构造开拓了一个崭新的方向。TVD 是对格式的一个很强的限制条件,使格式在局部极值点只能达到一阶精度,为了提高 TVD 格式的精度, Harten 等^[30]提出本质上无振荡 (essentially non-oscillatory, ENO) 格式的概念和构建方法,该法采用逐次扩展的节点模板,根据各阶差商绝对值极小的选择原则提高插值精度,由此构建成高分辨率 ENO 格式。Shu^[31]提出了总变差有界 (total variation bounded, TVB) 格式的概念; Liu 等^[32,33]提出加权本质无振荡 (weighted essentially non-oscillatory, WENO) 格式,通过引入权重系数将所有插值模板包含在内,改进了 ENO 插值模板选择方案,提高了计算效率,因此得到更为广泛的应用。人们以一阶迎风 MBS 和二阶精度 MBS 为基础 (或起步) 格式通过使用通量限制器 (flux limiter^[34~37])、通量修正 (flux corrected^[38~41])、自适应杂交 (self-adjusting hybrid^[42,43])、重构演化 (reconstruction-evolution)^[44,45]等方法构建了许多 TVD, ENO 等高级离散格式。Laney^[1]在专著《计算气体动力学》中详细介绍了这些格式,其中冠以人名的格式 1998 年以前已达 30 多个,说明分辨激波算法和格式之重要,研究之热闹,成果之丰硕,尚无完美格式的情况,这些格式均离不开对数值耗散、数值色散和数值群速度的人为检察、判断和自适应调节。张涵信^[46]基于调整激波上、下游三阶色散关系的考虑,提出了具有 TVD 性质的无波

动、无自由参数耗散差分 (non-oscillatory, non-free-parameter dissipation difference, NND) 格式,他和作者^[47,48]系统发展了包括通量型、原始变量型、守恒变量型、特征变量型、迎风型等 NND 格式。郭华谟^[49]设计了构建 ENO 格式的统一方法并提出统一 ENO(UENO) 格式,并推广到有限体积方法中^[50,51]。

其他的高级离散方法还有紧致 (compact) 格式,通过引入结点导数项提高格式精度的紧致方法从 20 世纪 90 年代起逐渐成为高精度格式研究的一个重要方向^[52~67]。Lale^[52]发展了一系列对称型线性紧致格式;文献^[53,54]构建了迎风型紧致格式和通过群速度控制重构紧致格式的新格式;文献^[55~59]构建了 Pade 型紧致格式与 ENO 及 WENO 混合的杂交格式,文献^[60,61]使用 TVB 概念和通量限制器技术构建了高精度非线性紧致格式,并用于激波计算;沈孟育等^[62]构建了广义紧致格式;申义庆等^[63]构建了有限紧致格式;邓小刚等^[64~67]构建了一系列内点高精度非线性紧致格式以及相关的高阶边界格式和靠近边界的“紧致”格式。文献^[68~72]发展了求解简化 Boltzmann 方程的气体动力论 (gas kinetics) 方法,为数值模拟从稀薄流到连续流提供了一种有效的统一算法,可以计算 N-S 模拟和直接模拟蒙特卡罗 (DSMC)^[73]不适用的流动领域。Chang^[74]将时间和空间同等对待,从积分方程出发通过定义解元 (SE) 和守恒元 (CE) 使得在局部和整体都满足守恒律,由此提出的 CE/SE 格式在多个领域得到应用^[75]。Wang 等^[76~78]提出有限谱 (FS) 方法和有限谱与 QUICK 及 ENO 杂交的格式。文献^[79~81]基于对流项插值近似的巧妙设计,提出了三次插值拟粒子 (cubic interpolated pseudo-particle, CIP) 和约束插值剖面 (constrained interpolation profile, CIP) 方法,在固体、流体和等离子体问题中得到广泛应用。Ni 等^[82,83]提出相容守性和相容投影格式。Morris 等^[84]和 Batten 等^[85]针对气动噪声计算,提出了联立求解 NS 方程组和非线性扰动方程的非线性声学摄动 (扰动) 算子。文献^[86~91]为了求解对流扩散方程引入了迎风数学变换,在此基础上将对流导数的系数 (视作函数) 取 Taylor 展开,近似到 (或截止到) 系数的二阶导数项,获得对流扩散方程的三结点四阶精度显式紧致差分格式,称为摄动差分格式 (PDS),PDS 用于模型方程,二维对流传热计算获得很好的结果,得到对流传热

计算的新的 Benchmark 数值结果. 作者提出数值摄动算法, 包括数值摄动差分算法^[92,93]和数值摄动有限体积算法^[94,95], 该算法与通常的隐式紧致格式^[52~67]和显式紧致 PFD 格式^[86~91]不同, 将 NS 方程组离散的最简单数学基本格式 (MBS) 即一阶迎风和二阶中心格式进行数值摄动重构, 包括利用所有结点变量的全域 (或单重) 摄动重构^[91~94]和分别使用上游结点和下游结点变量的双重摄动重构^[96~98], 由此构建成 NS 方程和对流扩散方程 (CD) 的最简单 MBS 耦合流体动力学效应的非线性摄动有限差分格式 (PDS) 和摄动有限体积格式 (PVS). 摄动格式用于模型方程、不可压缩流、可压缩流、液滴萃取传质过程、微通道两相流等均获得良好数值结果或与已有 Benchmark 数值解一致的数值结果^[92~120]. 本文评述数值摄动算法和相应

格式的理论 and 数值研究进展, 内容包括: CFD 数值离散的数学基本格式 (MBS)、数值摄动算法和 MBS 耦合流体动力学的摄动格式: I 摄动有限差分格式 (PDS) 和 II 摄动有限体积格式 (PVS), PDS 和 PVS 特性分析和应用计算.

2 CFD 数值离散的数学基本格式 (MBS)

流体力学和对流传导的基本方程组包含的导数项有一阶 (对流和压力项) 和二阶 (黏性和热传导) 导数项; 一、二阶导数离散的最简单格式为一阶迎风和二阶中心格式, 它们符合导数的原始数学定义, 因此称为直接差分或数学基本格式 (MBS)^[1~6]. 表 1 给出一阶和二阶导数离散的诸数学基本格式 (MBS).

表 1 对流导数 f'_i 和黏性导数 f''_i 离散诸格式 (MBS)

MBS	f'_i 离散诸格式	节点数	R_{cri}
2CS	$\frac{1}{2h}(f_{i+1} - f_{i-1})$	3	2
4CS	$\frac{1}{12h}[8(f_{i+1} - f_{i-1}) - (f_{i+2} - f_{i-2})]$	5	1.5
6CS	$\frac{1}{60h}[45(f_{i+1} - f_{i-1}) - 9(f_{i+2} - f_{i-2}) + (f_{i+3} - f_{i-3})]$	7	1.33
8CS	$\frac{1}{h}[0.8(f_{i+1} - f_{i-1}) - 0.2(f_{i+2} - f_{i-2}) + 0.0381(f_{i+3} - f_{i-3}) - 3.57 \times 10^{-3}(f_{i+4} - f_{i-4})]$	9	1.25
10CS	$\frac{1}{2520h}[2100(f_{i+1} - f_{i-1}) - 600(f_{i+2} - f_{i-2}) + 150(f_{i+3} - f_{i-3}) - 25(f_{i+4} - f_{i-4}) + 2(f_{i+5} - f_{i-5})]$	11	1.20
1US	$\frac{1}{h}(f_i - f_{i-1})$	3	∞
2US	$\frac{1}{2h}(3f_i - 4f_{i-1} + f_{i-2})$	5	∞
3US	$\frac{1}{6h}(3f_i - 6f_{i-1} + f_{i-2} + 2f_{i+1})$	5	3
5US	$\frac{1}{60h}(20f_i - 60f_{i-1} + 15f_{i-2} - 2f_{i-3} + 30f_{i+1} - 3f_{i+2})$	7	2
7US	$\frac{1}{h}(0.25f_i - f_{i-1} + 0.3f_{i-2} - 6.67 \times 10^{-2}f_{i-3} + 7.14 \times 10^{-3}f_{i-4} + 0.6f_{i+1} - 0.1f_{i+2} - 9.52 \times 10^{-3}f_{i+3})$	9	1.67
9US	$\frac{1}{2520h}(504f_i - 2520f_{i-1} + 840f_{i-2} - 240f_{i-3} + 45f_{i-4} - 4f_{i-5} + 1680f_{i+1} - 360f_{i+2} + 60f_{i+3} - 5f_{i+4})$	11	1.50
2CS	$\frac{1}{h^2}(f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1})$	3	
4CS	$\frac{1}{28h^2}(-f_{i+2} + 16f_{i+1} - 30f_i + 16f_{i-1} - f_{i-2})$	5	
6CS	$\frac{1}{36h^2}(4f_{i+3} - 27f_{i+2} + 108f_{i+1} - 170f_i + 108f_{i-1} - 27f_{i-2} + 4f_{i-3})$	7	

针对流体运动科学和工程计算的需要, CFD 常常使用精度高于二阶的迎风和中心 MBS, 高阶 MBS 可利用导数的广义数学定义由如下公式求出

$$\frac{d^m f(x_i)}{dx^m} = \sum_{j=-J_1}^{J_2} \alpha_j f_{i+j} \quad (1)$$

其中, α_j 通过 Taylor 展开式来确定; J_1 和 J_2 为正整数, 当 $J_2 = J_1$ 时 MBS 为中心差分格式, 格式精度为 $2J_1$ 精度; 当 $J_1 \neq J_2$ 时 MBS 为偏心 (或迎风) 差分格式。

表 1 中给出了的一维对流扩散方程空间离散的稳定条件 (即格式为稳定的临界网格 Reynolds 数 R_{cri}), 是利用一维对流扩散方程的 MBS (其中对流导数离散为表 1 中的诸 MBS, 黏性导数离散为二阶中心差分格式), 并令下游第 1 结点处的对流反扩散等于黏性物理扩散, 或利用所谓“符号不变原则”^[6] 的线性稳定性分析求出的。

在 CFD 诸 MBS 中, 一阶迎风格式普适性最好, 但数值耗散太大^[2], 大涡模拟 (LES) 的计算表明高阶迎风格式 (五阶、七阶) 的数值耗散依然不小。通常认为 (如文献 [2]) 在诸 MBS 中基于简单性、精度、效率、鲁棒性等因素的综合考虑, 特别是针对工程应用计算, 二阶中心格式是最佳选择; 事实上, Jameson 等的二阶中心有限体积格式已得到广泛使用^[8, 26~28]。但是二阶中心格式为正型的临界网格 Reynolds 数 R_{cri} 仅约为 2, 更高阶中心格式的 R_{cri} 比 2 还小, 高阶 (≥ 3) 迎风格的 R_{cri} 与 2 相近 (见表 1), 这些格式在网格不够密时, 容易产生振荡和发散, 特别是难以分辨激波和接触间断。为此, 正如引言中所述人们通过使用通量限制器、通量分裂耗散修正、通量修正、自适应杂交、人工黏性和重构演化等^[1] 迎风和光滑化技术对 MBS 进行重构, 构建出许多在光滑区为高精度在陡变区具有间断分辨率的高级 (advanced) 离散算法和格式。引言中对高级离散格式的简述是数值摄动算法研究, 即对 MBS 进行数值摄动重构研究的必要铺垫和基础。

3 数值摄动算法和 NS 方程组离散 MBS 耦合流体动力学的摄动格式

3.1 一般考虑, 数值摄动算法与其他算法的关系和优缺点比较

数值摄动算法对导数或方程离散的 MBS 的

重构^[92~98], 不使用任何调节数值耗散的人为技巧, 不增加结点, 不在格式中引入结点导数, 而是通过对通量和导数系数的数值摄动重构和对方程本身的解析运算, 将流动物理诸过程 (对流、扩散、压力、加速度等) 相互竞争的动力学特性耦合进 MBS 中, 从而获得 MBS 耦合流体动力学的摄动差分格式 (PDS) 和摄动有限体积格式 (PVS), 这使它们比 MBS 刻划流动更准确、精度更高、稳定范围更大。

数值摄动算法的具体做法^[92~98] 是: 对 MBS 的界面通量或导数系数 (如时间导数系数为 1, 对流导数系数为 1 (守恒型) 和 u_i (非守恒型) 等) 进行数值摄动重构, 即将它们重构为步长的幂级数; 利用空间分裂、时间 - 空间分裂和对一维方程的解析运算, 求得待求函数高阶导数与一阶导数或与待求函数本身的高阶流体力学线性关系式; 并将结点变量取 Taylor 展开, 通过消除摄动重构格式修正微分式或修正微分方程中截断误差诸项的办法, 求出步长幂级数的待定系数; 最终获得导数或方程离散的 MBS 耦合流体动力学的非线性摄动差分格式 (PDS) 和摄动有限体积格式 (PVS)。

下面以三结点格式为例, 进一步讨论数值摄动算法与其他算法的关系及优缺点比较。摄动算法在维持三结点不动的前提下 (如图 1), 根据紧致格式利用导数提高格式精度的紧致思想提高摄动格式的精度, 但由于摄动处理利用了速度等待求量高阶导数与一阶导数之间的线性关系式, 因此摄动格式中不含有新的待求量——导数 f'_{j-1} , f'_j 和 f'_{j+1} 。与高精度多结点格式和紧致格式相比, 高精度摄动格式不增加结点又不包含新的待求量 (导数), 这是它的第 1 个突出优点。

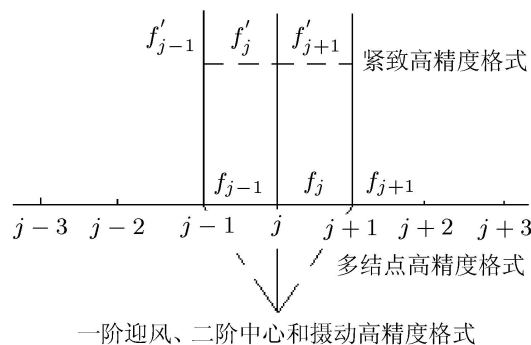


图 1 高精度诸格式 (紧致、多结点和摄动格式) 关系示意图

对二阶中心 (MBS) 格式的双重摄动重构, 即分别对上游结点和下游结点进行的摄动重构, 本

质上是下游不影响上游的对流运动规律引进了摄动格式之中, 即把迎风机制引入了二阶中心格式之中; 因此构建了一些不振荡摄动格式, 包括三结点高精度绝对稳定中心摄动差分格式 (PDS) 和插值近似高精度绝对正型 (positive) 中心摄动有限体积格式 (PVS). 对多结点 (例如五结点三阶迎风差分) 格式的摄动重构也得到类似的结果. 三结点绝对稳定中心 PDS 和迎风 PDS, 均具有 TVD 性质且为高阶精度格式; 已有的双曲守恒律和对流扩散方程的三结点 TVD 格式, 它们的精度均不会超过二阶 [1,28,29]. 这是数值摄动算法的第 2 个突出优点.

利用高精度迎风 PDS 和 PVS 以及高精度绝对稳定中心 PDS 和绝对正型中心 PVS 计算非线性 Burgers 方程, 网格很粗也不产生振荡解, 对一维间断解均有较高的分辨率. 但用迎风 PDS 和 PVS 计算二维间断解时虽不振荡, 但数值耗散较大, 与一阶迎风格式的耗散差别不大, 这是数值摄动算法的重要缺陷, 大大影响了其在可压缩流计算中的应用. 引起上述缺陷的主要原因是: 摄动处理中利用的待求量 (例如速度) 的高阶流体力学关系均为线性关系式. 为了消除摄动法的上述缺陷, 应将摄动格式和 Riemann 间断解、调解耗散的通量限制器等技术相结合, 以提高摄动格式对二维和三维间断解的分辨率. 从上述相结合的角度看, 可以认为对通过调节数值耗散、色散等特性重构高分辨率格式的已有众多深入的研究, 摄动格式提供了比相应数学基本格式 (MBS) 更精确且同样简单的基础和超步格式. 这方面, 申义庆等 [107~109], 代民果 [115] 分别构建了摄动格式与 Roe 格式 [18] 和 AUSM 格式 [24,25] 的杂交格式, 杂交格式的计算精度比原格式均有显著的改进.

3.2 NS 方程组最简单 MBS 耦合流体动力学的摄动格式

不失一般性, 考虑二维不可压 Navier-Stokes(NS) 方程组中 x 方向动量守恒方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \gamma \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (2)$$

方程 (2) 数值离散的最简单数学基本格式 (MBS) 是显式、时间一层、空间三结点差分格式,

即方程 (2) 的最简单 MBS 是

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta t} (u_{ij}^{n+1} - u_{ij}^n) + \frac{u_{ij}^n}{2\Delta x_{ij}} \cdot \\ & \left\{ \begin{aligned} & [(1 - \alpha_x)(u_{i+1,j}^n - u_{ij}^n) + \\ & (1 + \alpha_x)(u_{ij}^n - u_{i-1,j}^n)] \\ & (u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n) \end{aligned} \right\} + \\ & \frac{v_{ij}}{2\Delta y_{ij}} \left\{ \begin{aligned} & [(1 - \alpha_y)(u_{i,j+1}^n - u_{ij}^n) + \\ & (1 + \alpha_y)(u_{ij}^n - u_{i,j-1}^n)] \\ & (u_{i,j+1}^n - u_{i,j-1}^n) \end{aligned} \right\} = \\ & -\frac{1}{2\rho\Delta x_{ij}} (p_{i+1,j}^n - p_{i-1,j}^n) + \gamma \left[\frac{1}{\Delta x_{ij}^2} (u_{i+1,j}^n - \right. \\ & \left. 2u_{ij}^n + u_{i-1,j}^n) + \frac{1}{\Delta y_{ij}^2} (u_{i,j+1}^n - 2u_{ij}^n + u_{i,j-1}^n) \right] \quad (3) \end{aligned}$$

其中, $\alpha_x = \text{sgn}u_{ij}^n$, $\alpha_y = \text{sgn}v_{ij}^n$. 方程组 (3) 包括两个方程, 第 1 个方程的对流项为左端大括号内的第 1 行 (迎风差分近似), 第 2 个方程的对流项为左端大括号内的第 2 行 (中心差分近似); 两个方程的时间项相同, 压力项相同, 黏性项相同, 因此这 3 项没有重复书写. 两个方程的这种表达方式具有节省篇幅避免重复的好处, 文中将多次使用这种表达方式. 这里考虑了显式 MBS, 隐式 MBS 的摄动重构与显式相同. 对方程 (2) 最简单 MBS(3) 的摄动重构是将时间差商系数 1、对流差商系数 u_{ij}^n (和 v_{ij}^n)、压力差商系数 $\frac{1}{\rho}$ 和黏性差商系数 γ 重构为它们分别乘以步长 Δx 或 Δt 的幂级数 (对 v_{ij}^n 则是 v_{ij}^n 乘以步长 Δy 的幂级数); 采用空间分裂处理, 在 x 方向有

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta t} G_{tx} G_{ty} (u_{ij}^{n+1} - u_{ij}^n) + \\ & \frac{u_{ij}^n}{2\Delta x_{ij}} \left\{ \begin{aligned} & G_{ux} [(1 - \alpha_x)(u_{i+1,j}^n - u_{ij}^n) + \\ & (1 + \alpha_x)(u_{ij}^n - u_{i-1,j}^n)] \\ & G_{cx} (u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n) \\ & [G_{cx}^+ (u_{i+1,j}^n - u_{ij}^n) + \\ & G_{cx}^- (u_{ij}^n - u_{i-1,j}^n)] \end{aligned} \right\} = \\ & -\frac{1}{2\rho\Delta x_{ij}} \left\{ \begin{aligned} & G_{px} (p_{i+1,j}^n - p_{i-1,j}^n) \\ & [G_{px}^+ (p_{i+1,j}^n - p_{ij}^n) + \\ & G_{px}^- (p_{ij}^n - p_{i-1,j}^n)] \end{aligned} \right\} + \\ & \frac{\gamma}{\Delta x_{ij}^2} (u_{i+1,j}^n - 2u_{ij}^n + u_{i-1,j}^n) \quad (4) \end{aligned}$$

其中, 单重摄动压力差分项同时适用于单重摄动

迎风和中心对流差分项, 数值摄动重构诸函数 G_{tx} , G_{ux} , G_{cx} , G_{cx}^+ , G_{cx}^- , G_{px} , G_{px}^+ 和 G_{px}^- 分别为

$$\begin{aligned} G_{tx} &= 1 + \sum_{m=1}^M T_{xm} \Delta t^m, & G_{ux} &= 1 + \sum_{m=1}^M a_m \Delta x^m, \\ G_{cx} &= 1 + \sum_{m=1}^M b_m \Delta x^m, & G_{cx}^+ &= 1 + \sum_{m=1}^M b_m^+ \Delta x^m, \\ G_{cx}^- &= 1 + \sum_{m=1}^M b_m^- \Delta x^m, & G_{px} &= 1 + \sum_{m=1}^M c_m \Delta x^m, \\ G_{px}^+ &= 1 + \sum_{m=1}^M c_m^+ \Delta x^m, & G_{px}^- &= 1 + \sum_{m=1}^M c_m^- \Delta x^m \end{aligned} \quad (5)$$

为了求得式 (5) 中的诸数值摄动重构函数 (NPRF), 文献 [92~98] 提出一些重构原则, 主要的原则及其简要说明如下:

(1) 诸项 (流动物理诸过程) 相互作用范围的尺度原则及相应的无量纲数: 对流扩散在 $\Delta x \sim \gamma/u_{ij}$ 尺度范围相互作用, 因此对流扩散项耦合重构的 NPRF 应是无量纲数, 即网格 Reynolds 数 $R_{\Delta x} = u_{ij} \Delta x / \gamma$ 的函数; 压力项 (以及能量方程中的压力功项) 与对流项在 L (流场特征长度) 或 Δx 尺度上相互作用, 同时由于对流扩散相互作用, 压力也与扩散项在 γ/u_{ij} 尺度上相互作用, 因此压力 - 对流 - 扩散耦合重构或压力项重构的 NPRF 同样应是无量纲数 $R_{\Delta x}$ 的函数; 时间项与对流项在 L/U (L 和 U 分别为流场特征长度和流速) 或 $\Delta x/u_{ij}$ 时间上相互作用, 又通过扩散对流竞争与扩散项在 γ/u_{ij}^2 时间上相互作用, 因此时间项重构的 NPRF 应是无量纲数 $R_{\Delta x}$ 与 $u_{ij} \Delta t / \Delta x$ 乘积的函数, $u_{ij} \Delta t / \Delta x$ 是网格 CFL 数.

(2) 诸项各自单独重构原则和两项或多于两项耦合重构原则: 若一些项的坐标变量和差商未知函数都相同, 则这些项应耦合重构, 例如对流扩散两项满足此条件, 耦合重构只需对一阶导数系数 (如 u_{ij}) 进行重构, 而维持二阶导数系数 γ 不变; 若两项包含的坐标变量和差商未知函数只有一项相同, 例如格式 (3) 中的时间项和压力项, 则对它们应进行各自的单独重构.

(3) 全域重构原则和上、下游重构原则: 利用网格内所有结点变量进行的重构为全域 (或单重) 摄动重构. 分别利用网格内上游和下游结点变量进行的重构, 称为双重摄动重构; 例如对三结点网格, 若 $u_i > 0$, 上游结点为 $(i-1, i)$, 下游结点为 $(i, i+1)$. 双重摄动重构的最大好处 [96~100] 是将下游不影响上游的对流运动规律引入了格式之

中, 因此可将下 (上) 游结点对流反扩散这一造成格式失稳的有害影响限制在下 (上) 游而完全不向上 (下) 游扩散, 由此在提高摄动格式 (PS) 精度同时又可大大扩大 PS 的稳定域范围. 例如在 PS(4) 中, 不仅引入了对流扩散耦合重构的迎风型和中心型全域 NPRF G_{ux} 和 G_{cx} , 也引入了中心型双重摄动 NPRF G_{cx}^+ 和 G_{cx}^- , 引入了压力项的全域 NPRF G_{px} 和区分上、下游的双重摄动 NPRF G_{px}^+ 和 G_{px}^- .

(4) 源项的重构原则: 源项是计算结点上的外加函数, 因此源项在 γ/u_{ij} 尺度上影响流体运动, 对源项离散 MBS 的重构可与对流扩散项耦合进行重构, 在耦合重构的情况下源项的 NPRF 与对流项的 NPRF 相一致 [92~98].

(5) 广义源项处理: 在 NS 方程组离散 MBS 的重构中, 一些文献 (如文献 [108, 109]) 将对流扩散项以外的其他所有项合在一起作为源项 (称为广义源项) 处理; 由重构原则 (4) 可知, 广义源项方法可给出 NS 方程组离散的一类公式最简单的摄动格式 (PS).

根据上述重构原则, 可对格式 (4) 顺序进行对流 - 扩散项耦合重构、压力项重构以及时间项重构.

3.2.1 对流 - 扩散项耦合离散摄动差分格式 (PDS)

对流 - 扩散项耦合离散的重构格式, 其实正是一维对流扩散方程离散的最简单 MBS 耦合流体动力学的摄动差分格式 (PDS), 即

$$\frac{u_{ij}}{2\Delta x_{ij}} \left\{ \begin{array}{l} G_{ux} [(1 - \alpha_x)(u_{i+1,j}^n - u_{ij}^n) + \\ \quad (1 + \alpha_x)(u_{ij}^n - u_{i-1,j}^n)] \\ G_{cx}(u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n) \\ [G_{cx}^+(u_{i+1,j}^n - u_{ij}^n) + \\ \quad G_{cx}^-(u_{ij}^n - u_{i-1,j}^n)] \end{array} \right\} = \frac{\gamma}{\Delta x_{ij}^2} (u_{i+1,j}^n - 2u_{ij}^n + u_{i-1,j}^n) \quad (6)$$

将式 (5) 中 G_{ux} , G_{cx} , G_{cx}^+ 和 G_{cx}^- 代入重构格式 (6), 再将 $u_{i\pm 1,j}^n$ 对空间点 ij 作 Taylor 展开, 利用冻结对流项系数 u_{ij} 和扩散项系数 γ 的条件下导出的速度高阶导数与一阶导数的如下关系 (称为速度的高阶流体力学线性关系式)

$$\frac{\partial^m u}{\partial x^m} = \left(\frac{u_{ij}^n}{\gamma} \right)^{m-1} \frac{\partial u}{\partial x} \quad (7)$$

通过消除对流 - 扩散耦合重构格式修正微分式, 即通过消除一维对流 - 扩散方程离散 PDS 修正微分方程的截断误差诸项, 也就是令 $\Delta x^n (n = 1, 2, \dots)$ 的系数为零可求得诸 a_n, b_n, b_n^+ 和 b_n^- , 将它们代入式 (5) 得到诸 NPRF, 将诸 NPRF 代入格式 (6) 得到一维对流扩散方程离散的最简单 PDS 的最终形式, 诸 NPRF 的具体形式为 [92~98]

$$G_{ux} = 1 + \sum_{m=1}^M \frac{1}{(m+1)!} (R_{\Delta x_{ij}} \text{sgn} u_{ij})^m \quad (8)$$

$$G_{cx} = 1 - \frac{1}{12} R_{\Delta x_{ij}}^2 + \frac{1}{30} R_{\Delta x_{ij}}^4 - \frac{1}{1260} R_{\Delta x_{ij}}^6 \quad (9)$$

$$G_{cx}^+ = 1 - \frac{1}{6} R_{\Delta x_{ij}} + \frac{1}{360} R_{\Delta x_{ij}}^3 - \frac{1}{3 \times 7!} R_{\Delta x_{ij}}^5 + \frac{3}{5 \times 9!} R_{\Delta x_{ij}}^7 - \frac{5}{3 \times 11!} R_{\Delta x_{ij}}^9 \quad (10)$$

$$G_{cx}^- = 1 + \frac{1}{6} R_{\Delta x_{ij}} - \frac{1}{360} R_{\Delta x_{ij}}^3 + \frac{1}{3 \times 7!} R_{\Delta x_{ij}}^5 - \frac{3}{5 \times 9!} R_{\Delta x_{ij}}^7 + \frac{5}{3 \times 11!} R_{\Delta x_{ij}}^9$$

其中 $R_{\Delta x_{ij}} = u_{ij} \Delta x_{ij} / \gamma$. 对 $v \frac{\partial u}{\partial y} = \gamma \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$ 离散 MBS 的数值摄动重构可类似地进行, 并有

$$\frac{v_{ij}}{2\Delta y_{ij}} \left\{ \begin{array}{l} G_{uy}[(1 - \alpha_y)(u_{i,j+1}^n - u_{ij}^n) + \\ (1 + \alpha_y)(u_{ij}^n - u_{i,j-1}^n)] \\ G_{cy}(u_{i,j+1}^n - u_{i,j-1}^n) \\ [G_{cy}^+(u_{i,j+1}^n - u_{ij}^n) + \\ G_{cy}^-(u_{ij}^n - u_{i,j-1}^n)] \end{array} \right\} = \frac{\gamma}{\Delta y_{ij}} (u_{i,j+1}^n - u_{ij}^n + u_{i,j-1}^n) \quad (11)$$

在式 (8) ~ 式 (10) 中将 $x, \Delta x_{ij}$ 和 u_{ij} 同时换成 $y, \Delta y_{ij}$ 和 v_{ij} , 将 $R_{\Delta x_{ij}}$ 换成 $R_{\Delta y_{ij}} = v_{ij} \Delta y_{ij} / \gamma$ 即可给出 G_{uy}, G_{cy}, G_{cy}^+ 和 G_{cy}^- .

3.2.2 时间项离散的摄动差分格式 (PDS)

根据数值摄动重构原则知道, 对时间项离散数学基本格式 (MBS) 的重构应单独进行, 重构格式即 PDS 为

$$\frac{1}{\Delta t} G_{tx} (u_{ij}^{n+1} - u_{ij}^n) = \frac{1}{\Delta t} \left(1 + \sum_{m=1}^M T_{xm} \Delta t^m \right) (u_{ij}^{n+1} - u_{ij}^n) \quad (12)$$

在格式 (12) 中将 u_{ij}^{n+1} 对 n 时间层取 Taylor 展开, 利用冻结对流系数 u_{ij} 条件下, 时间导数 $\frac{\partial u}{\partial t}$ 与对流导数 $\frac{\partial u}{\partial x}$ 之间的关系以及 $\frac{\partial u}{\partial x}$ 与黏性导数 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 之间的关系推导出的如下时间 - 对流 - 扩散的高阶流体力学线性关系式

$$\frac{\partial^m u}{\partial t^m} = \left(-\frac{u_{ij}^2}{\gamma} \right)^{m-1} \frac{\partial u}{\partial t} \quad (13)$$

通过消除重构格式 (12) 修正微分式截断误差诸项, 即令 Δt^m 系数为零可求得 T_{xm} 和 G_{tx}

$$G_{tx} = 1 + \frac{1}{2} |R_{\Delta x_{ij}} \lambda_x| + \frac{1}{12} (R_{\Delta x_{ij}} \lambda_x)^2 - \frac{1}{720} (R_{\Delta x_{ij}} \lambda_x)^4 + \frac{1}{40 \times 720} (R_{\Delta x_{ij}} \lambda_x)^6 \quad (14)$$

其中 $R_{\Delta x_{ij}} = u_{ij} \Delta x_{ij} / \gamma$, $\lambda_x = u_{ij} \Delta t / \Delta x_{ij}$, λ_x 为 x 方向网格 CFL 数. 通过类似的运算可求得 G_{ty} , 故时间项离散的摄动差分格式 (PDS) 的时间一层三阶精度格式为

$$\frac{1}{\Delta t} \left[1 + \frac{1}{2} |R_{\Delta x_{ij}} \lambda_x| + \frac{1}{12} (R_{\Delta x_{ij}} \lambda_x)^2 \right] \times \left[1 + \frac{1}{2} |R_{\Delta y_{ij}} \lambda_y| + \frac{1}{12} (R_{\Delta y_{ij}} \lambda_y)^2 \right] (u_{ij}^{n+1} - u_{ij}^n) \quad (15)$$

其中 $R_{\Delta y_{ij}} = v_{ij} \Delta y_{ij} / \gamma$, $\lambda_y = v_{ij} \Delta t / \Delta y_{ij}$ 为 y 方向网格 CFL 数.

3.2.3 压力项离散的摄动差分格式 (PDS)

根据重构原则可知, 对压力项离散数学基本格式 (MBS) 的重构可单独进行, 与对流扩散耦合重构的全域和上、下游重构相对应, 压力项离散的 PDS 为 (参见格式 (4))

$$\frac{1}{2\rho \Delta x_{ij}} G_{px} (p_{i+1,j}^n - p_{i-1,j}^n)$$

或

$$\frac{1}{2\rho \Delta x_{ij}} [G_{px}^+ (p_{i+1,j}^n - p_{i,j}^n) + G_{px}^- (p_{i,j}^n - p_{i-1,j}^n)] \quad (16)$$

在格式 (16) 中将 $p_{i\pm 1,j}^n$ 对 p_{ij}^n 取 Taylor 展开, 利用冻结对流系数 u_{ij} 条件下, 压力导数 $\frac{\partial p}{\partial x}$ 与对流导数 $\frac{\partial u}{\partial x}$ 之间的关系以及 $\frac{\partial u}{\partial x}$ 与黏性导数 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 之间的关系推出的如下压力 - 对流 - 扩散的高阶流体力学线性关系式

$$\frac{\partial^m p}{\partial x^m} = \left(\frac{u_{ij}}{\gamma} \right)^{m-1} \frac{\partial p}{\partial x} \quad (17)$$

通过消除格式 (16) 修正微分式的诸截断误差项, 即令 Δx^m 同次幂系数为零求得 C_m, C_m^+ 和 C_m^- , 由此求得 NPRF G_{px}, G_{px}^+ 和 G_{px}^- , 压力项 $\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x}$ 离散的 PDS 即为

$$\frac{1}{2\rho\Delta x_{ij}} \left(1 - \frac{1}{6}R_{\Delta x_{ij}}^2 + \frac{7}{360}R_{\Delta x_{ij}}^4 - \frac{31}{3 \times 7!}R_{\Delta x_{ij}}^6 + \frac{127}{15 \times 8!}R_{\Delta x_{ij}}^8 \right) (p_{i+1,j}^n - p_{i-1,j}^n) \tag{18}$$

和

$$-\frac{1}{2\rho\Delta x_{ij}} \left[\left(1 - \frac{1}{2}R_{\Delta x_{ij}} + \frac{1}{12}R_{\Delta x_{ij}}^2 - \frac{1}{6!}R_{\Delta x_{ij}}^4 + \frac{1}{6 \times 7!}R_{\Delta x_{ij}}^6 \right) (p_{i+1,j}^n - p_{ij}^n) + \left(1 + \frac{1}{2}R_{\Delta x_{ij}} + \frac{1}{12}R_{\Delta x_{ij}}^2 + \frac{1}{6!}R_{\Delta x_{ij}}^4 + \frac{1}{6 \times 7!}R_{\Delta x_{ij}}^6 \right) (p_{ij}^n - p_{i-1,j}^n) \right] \tag{19}$$

压力项 $\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y}$ 离散的摄动差分格式 (PDS) 可类似求出, 在格式 (18) 和 (19) 中将 $\Delta x_{ij}, u_{ij}^n, p_{i\pm 1,j}^n$ 分别换成 $\Delta y_{ij}, v_{ij}^n$ 和 $p_{i,j\pm 1}^n$, 即得到 $\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y}$ 离散的 PDS.

能量方程中压力功项 $(\mathbf{u} \cdot \nabla)p$ 离散最简单 MBS 的数值摄动重构格式 (即 PDS), 可类似导出压力项 PDS 的办法求出, 这里不再重复.

3.2.4 源项离散的摄动差分格式 (PDS)

方程中的源项 q , 包括常数源和函数源项, 它们作为外加项与流动物理诸过程 (对流、扩散、压力) 之间的相互作用, 一般来说并无明确的特征尺度, 它们作为计算结点上的外加量影响流体运动, 因此可把对流 - 扩散 - 源项耦合进行数值摄动重构; 为此可在对流扩散耦合离散 PDS (参见 3.2.1 节) 中加入摄动重构源项, 即有

$$\frac{u_{ij}}{2\Delta x_{ij}} \left\{ \begin{array}{l} G_{ux} [(1 - \alpha_x)(u_{i+1,j}^n - u_{ij}^n) + (1 + \alpha_x)(u_{ij}^n - u_{i-1,j}^n)] \\ G_{cx}(u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n) \\ G_{cx}^+(u_{i+1,j}^n - u_{ij}^n) + G_{cx}^-(u_{ij}^n - u_{i-1,j}^n) \end{array} \right\} = \frac{\gamma}{\Delta x^2} (u_{i+1,j}^n - 2u_{ij}^n + u_{i-1,j}^n) + \left\{ \begin{array}{l} G_{us}q \\ G_{cs}q \\ \frac{1}{2}(G_{cs}^+ + G_{cs}^-)q \end{array} \right\} \tag{20}$$

其中源项的数值摄动重构函数 (NPRF) 为

$$G_{us} = 1 + \sum_{m=1}^M f_m \Delta x^m, G_{cs} = 1 + \sum_{m=1}^M g_m \Delta x^m, G_{cs}^+ = 1 + \sum_{m=1}^M g_m^+ \Delta x^m, G_{cs}^- = 1 + \sum_{m=1}^M g_m^- \Delta x^m \tag{21}$$

对重构格式 (20) 作类似于对重构格式 (6) 所作的处理和运算, 运算中利用如下源项 —— 速度的高阶流体力学线性关系式

$$\frac{\partial^m u}{\partial x^m} = \left(\frac{u_{ij}}{\gamma} \right)^{m-1} \frac{\partial u}{\partial x} - \left(\frac{u_{ij}}{\gamma} \right)^{m-2} q \tag{22}$$

可以求得

$$G_{us} = G_{ux}, G_{cs} = G_{cx}, G_{cs}^+ = G_{cx}^+, G_{cs}^- = G_{cx}^- \tag{23}$$

利用式 (23), 又可将重构格式 (20) 写成

$$\frac{u_{ij}}{2\Delta x_{ij}} \left\{ \begin{array}{l} [(1 - \alpha_x)(u_{i+1,j}^n - u_{ij}^n) + (1 + \alpha_x)(u_{ij}^n - u_{i-1,j}^n)] \\ (u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n) \\ [(u_{i+1,j}^n - u_{ij}^n) + (u_{ij}^n - u_{i-1,j}^n)] \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \frac{\gamma}{\Delta x^2} G_{ux} (u_{i+1,j}^n - 2u_{ij}^n + u_{i-1,j}^n) \\ \frac{\gamma}{\Delta x^2} G_{cx} (u_{i+1,j}^n - 2u_{ij}^n + u_{i-1,j}^n) \\ \frac{\gamma}{\Delta x^2} \left[\frac{1}{G_{cx}^+} (u_{i+1,j}^n - u_{ij}^n) + \frac{1}{G_{cx}^-} (u_{ij}^n - u_{i-1,j}^n) \right] \end{array} \right\} + q \tag{24}$$

摄动差分格式 PDS(24) 与 PDS(20) 相比, 实际是将对流通量的摄动重构改造为黏性通量的摄动重构.

3.3 NS 方程组的广义源项和相应的摄动差分格式 (PDS)

在 NS 方程组中, 黏性项除了 $\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_i^2} (i = 1, 2, 3)$ 项外, 还有剪切 (交叉导数) 黏性项、黏性耗散项等, 如果将 $\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_i^2}$ 项以外的其他所有黏性项以及压力项、压力功项、体力项等合起来作为源项, 称为广义源项, 则相应的 PDS 就是格式 (20) 和格式 (24), 此时 q 应指 NS 方程组的广义源项.

由于对流 - 扩散 - 源项三项耦合离散的 PDS 形式简洁、且 NPRF 就是对流 - 扩散二项耦合离散的 NPRF, 参见格式 (20)、格式 (24) 和式 (23). 因

此对 NS 方程组离散, 广义源项处理及相应的 NS 方程组离散 PDS 是很有用的, 特别是采用式 (24) 的 PDS 形式时. 这里以不可压缩二维 NS 方程组的 x 方向动量方程为例, 它的空间离散摄动差分格式 (PDS) 写出为

$$\begin{aligned}
 & \frac{u_{ij}}{2\Delta x_{ij}} \left\{ \begin{array}{l} [(1-\alpha_x)(u_{i+1,j}-u_{ij})+ \\ (1+\alpha_x)(u_{ij}-u_{i-1,j})] \\ (u_{i+1,j}-u_{i-1,j}) \\ [(u_{i+1,j}-u_{ij})+(u_{ij}-u_{i-1,j})] \end{array} \right\} + \\
 & \frac{v_{ij}}{2\Delta y_{ij}} \left\{ \begin{array}{l} [(1-\alpha_y)(u_{i,j+1}-u_{ij})+ \\ (1+\alpha_y)(u_{ij}-u_{i,j-1})] \\ (u_{i,j+1}-u_{i,j-1}) \\ [(u_{i,j+1}-u_{ij})+(u_{ij}-u_{i,j-1})] \end{array} \right\} = \\
 & \frac{\gamma}{\Delta x_{ij}^2} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{G_{ux}}(u_{i+1,j}-2u_{ij}+u_{i-1,j}) \\ \frac{1}{G_{cx}}(u_{i+1,j}-2u_{ij}+u_{i-1,j}) \\ \left[\frac{1}{G_{cx}^+}(u_{i+1,j}-u_{ij})+ \right. \\ \left. \frac{1}{G_{cx}^-}(u_{i-1,j}-u_{ij}) \right] \end{array} \right\} + \\
 & \frac{\gamma}{\Delta y_{ij}^2} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{G_{uy}}(u_{i,j+1}-2u_{ij}+u_{i,j-1}) \\ \frac{1}{G_{cy}}(u_{i,j+1}-2u_{ij}+u_{i,j-1}) \\ \left[\frac{1}{G_{cy}^+}(u_{i,j+1}-u_{ij})+ \right. \\ \left. \frac{1}{G_{cy}^-}(u_{i,j-1}-u_{ij}) \right] \end{array} \right\} - \\
 & \frac{1}{2\rho\Delta x_{ij}} \left\{ \begin{array}{l} \frac{G_{px}}{G_{ux}}(P_{i+1,j}-P_{i-1,j}) \\ \frac{G_{px}}{G_{cx}}(P_{i+1,j}-P_{i-1,j}) \\ \frac{G_{px}^+}{G_{cx}^+}(P_{i+1,j}-P_{ij})+ \\ \frac{G_{px}^-}{G_{cx}^-}(P_{ij}-P_{i-1,j}) \end{array} \right\} + q
 \end{aligned} \tag{24a}$$

NS 动量方程的 PDS (24a) 中用重构黏性通量代替原先的摄动重构对流通量, 好处是消除了空间分裂时其他方向对 x 方向的未知贡献; 例如在

x 动量方程的对流通量重构的 PDS 中还应包含交叉贡献项

$$(G_{ux}F_{yx} + G_{uy}F_{xy}) \tag{24b}$$

其中, F_{yx} 和 F_{xy} 分别表示 $y(x)$ 方向对 $x(y)$ 方向通量的贡献, 因此必有

$$F_{yx} + F_{xy} = 0 \tag{24c}$$

应当指出, 当离散涉及多个空间方向, 例如有限体积方法的离散, 式 (24c) 同样成立.

此外应指出, 根据各项独立离散重构原则, 在广义源项处理的 PDS 中, 如果需要的话, 仍可对压力项, 对流项和交叉导数黏性项等进行摄动二次重构.

3.4 小 结

(1) 对流 - 扩散耦合离散的摄动差分格式 (PDS) 和压力项离散的 PDS 均为它们离散的数学基本格式 (MBS) 乘以网格 Reynolds 数的简单多项式 (即乘以数值摄动重构函数 (NPRF)), 当 NPRF G_{cx} , G_{cx}^+ , G_{cx}^- , G_{px} , G_{px}^+ 和 G_{px}^- 截止到 $R_{\Delta x}^M$ 时, 在速度和压力的高阶流体力学线性关系式 (7) 和式 (17) 成立的条件下, 相应的重构中心型 PDS 的精度为 $(M+2)$ 阶精度; 当 NPRF G_{ux} 截止到 $R_{\Delta x}^M$ 项, 对流 - 扩散耦合离散的迎风型 PDS 为 $(M+1)$ 阶精度. 时间项离散的 PDS 为其离散 MBS 乘以 $(R_{\Delta x}\lambda_x)$ 的简单多项式, $\lambda_x = u_{ij}\Delta t/\Delta x_{ij}$ 为 x 方向网格 CFL 数, 当 NPRF G_{tx} 截止到 $(R_{\Delta x_{ij}}\lambda_x)^M$ 时, 时间项离散 PDS 的精度为 $(M+1)$ 阶.

(2) 对流 - 扩散项耦合离散的 PDS 其实就是一维对流 - 扩散方程离散的 PDS, 对迎风 PDS, 当 G_{ux} (见式 (8)) 截止到 $R_{\Delta x_{ij}}^M$ 项, 它为 $(M+1)$ 阶精度迎风格式, 各阶精度迎风 PDS 均只使用三结点, 且为绝对稳定格式; 因此迎风 PDS 明显优于一维对流 - 扩散方程离散的高阶迎风 MBS, 高阶迎风 MBS 必须使用多结点 (五结点、七结点等), 而且均为条件稳定格式 (见表 1). 此外, 当 G_{ux} 截止到 $R_{\Delta x_{ij}}^M$ 且 $M \rightarrow \infty$ 时, 迎风 PDS 给出线性对流扩散方程的精确数值解格式 [92,101,104].

(3) 对一维对流扩散方程离散的中心 PDS, 当 G_{cx} , G_{cx}^+ , G_{cx}^- (见式 (9) 和式 (10)) 截止到 $R_{\Delta x_{ij}}^M$ 项时, 中心 PDS 的精度为 $(M+2)$ 阶; 全域摄动 (单重摄动) 的中心 PDS 为条件稳定, 如四阶和六阶

PDS 稳定的临界网格 Reynolds 数 R_{cri} 分别约为 4.2 和 2.6. 区分上游和下游的双重摄动 PDS, 其中一些 (如四阶、八阶和十二阶精度 PDS) 为绝对稳定格式, 即这些格式稳定的临界网格 Reynolds 数 R_{cri} 为无穷大 (见文献 [96, 97] 和表 2), 用它们求解非线性 Burgers 方程, 很粗的网格也不会产生振荡解; 用四阶和八阶绝对稳定中心型 PDS 求解一维线性对流扩散方程均可达到各自的精度阶 (参见表 3). 将八阶精度绝对稳定中心 PDS 与八阶精度中心 MBS 作比较, 前者使用三结点, R_{cri} 为无穷大, 而后者使用八结点, R_{cri} 仅为 1.25 (见表 1). 总之, 单重摄动中心 PDS 和区分上下游双重摄动中心 PDS 均比中心 MBS 精度高, 特别是双重摄动 PDS 的稳定范围显著扩大 (见表 2), 事实上, 上、下游摄动重构将迎风机制 (即下游不影响上游的对流运动规律) 引进了二阶中心格式, 由此构建了高阶不振荡中心格式, 这是它最突出的优点; 因为对于 MBS, 随着 MBS 精度的提高, 稳定范围要减小 (见表 1).

下面讨论双重摄动三阶和四阶、七阶和八阶、十一阶和十二阶精度中心格式 (DPS) 绝对稳定的理论基础及物理原因. 对稳定性分析可考虑无源即 $f_i = 0$ 的情况, 此时三结点双重摄动 (DP) 高阶中心差分格式 (DPS) 可统一地写成

$$C_{i\pm 1}(N)\varphi_{i\pm 1} - [C_{i\pm 1}(N) + C_{i-1}(N)]\varphi_i + C_{i-1}(N)\varphi_{i-1} = 0 \quad (25)$$

其中 N 为格式精度阶, 对 3 阶和 4 阶, 7 阶和 8 阶, 11 阶和 12 阶精度 DPS, 用配平方法推出

$$C_{i\pm 1}(3) = C_{i\pm 1}(4) = \left(1 \mp \frac{1}{4}R_{\Delta x}\right)^2 + \frac{1}{48}R_{\Delta x}^2 \quad (25a)$$

$$C_{i\pm 1}(7) = C_{i\pm 1}(8) = \left(1 \mp \frac{1}{4}R_{\Delta x}\right)^2 + \frac{1}{48}R_{\Delta x}^2 \left(1 - \frac{1}{30}R_{\Delta x}^2\right)^2 + \frac{1}{20 \times 7!}R_{\Delta x}^6 \quad (25b)$$

$$C_{i\pm 1}(11) = C_{i\pm 1}(12) = \left(1 \mp \frac{1}{4}R_{\Delta x}\right)^2 + \frac{1}{48}R_{\Delta x}^2 \left(1 - \frac{1}{30}R_{\Delta x}^2\right)^2 + \frac{1}{20 \times 7!}R_{\Delta x}^6 \left(1 - \frac{1}{24}R_{\Delta x}^2\right)^2 + \frac{37}{4 \times 2!}R_{\Delta x}^{10} \quad (25c)$$

故对上述 6 个 DPS 有

$$C_{i+1}(N) > 0, C_{i-1}(N) > 0 \quad (25d)$$

($R_{\Delta x}$ 为任意值)

$$|C_i(N)| \geq |C_{i+1}(N)| + |C_{i-1}(N)| \quad (25e)$$

可见由离散方程 (25) 组建的线性代数方程组的系数矩阵, 对网格 Reynolds 数 $R_{\Delta x}$ 的任意值均为对角占优, 这 6 个 DPS 绝对稳定, 即它们稳定的临界网格 Reynolds 数 R_{cri} 为无穷大. 事实上, 离散方程 (25) 的通解为

$$\varphi_i = A + B \left(\frac{C_{i-1}}{C_{i+1}}\right)^i \quad (25f)$$

其中 A 和 B 由边界条件确定. 通解 (25f) 表明, 由于式 (25d) 成立, 故对 $R_{\Delta x}$ 的任意值, 上述 6 个 DPS 绝对稳定不会产生振荡解.

三结点高阶精度中心格式 (DPS) 绝对稳定的物理原因是: 区分上游和下游的双重摄动 (DP) 重构, 即对 i 和 $(i+1)$ 两结点与 i 和 $(i-1)$ 两结点分别进行的摄动重构切断了下游 $(i\pm 1)$ 结点和上游 $(i\mp 1)$ 结点之间的直接相互影响, 将下游不影响上游的对流运动规律引入摄动重构, 即将迎风机制引入二阶中心格式能够大大削弱对流反扩散的影响, 由此重构出物理扩散项恒大于对流反扩散项的绝对稳定中心格式 (DPS). 对流扩散方程的所有离散格式都含有对流反扩散项, 该项不符合下游不影响上游的对流运动规律, 物理上不合理, 数学上则是引起格式失稳的不稳定源, 当对流反扩散项大于等于物理扩散项时格式成为不稳定格式, 反之格式为稳定格式. 这就是三阶和四阶、七阶和八阶、十一阶和十二阶双重摄动中心差分格式 (DPS) 绝对稳定的物理原因. 不过应当强调, 由于双重摄动 (DP) 重构中, 计算结点 (i 结点) 变量既在上游重构中使用也在下游重构中使用, 因此没有完全切断下游上游之间的“对流”关联, 不能完全消除对流反扩散的影响, 甚至达到对流反扩散项超过物理扩散项的程度; 这就是五阶和六阶、九阶和十阶 DPS 在网格 Reynolds 数足够大时失稳 (例如五阶和六阶 DPS 稳定的临界网格 Reynolds 数 R_{cri} 约为 4) 的物理原因.

表 2 一维对流扩散方程的二阶中心差分格式 (2CDS)、单重摄动 (SP) 和双重摄动 (DP) 中心差分格式 (PDS) 的精度阶和 R_{cri} ^[96,97]

格式	2CDS	SP-PDS		DP-PDS			
精度阶	2	3 和 4	5 和 6	3 和 4	5 和 6	7 和 8	11 和 12
R_{cri}	2	4.2	2.6	∞	4.0	∞	∞

表 3 二阶中心格式 (2CDS) 和四阶、八阶绝对稳定中心 PDS^[96,97] 求解一维对流扩散方程的均方根误差及其精度阶

网格数	2CDS		4PDS		8PDS	
	均方根误差	精度阶	均方根误差	精度阶	均方根误差	精度阶
40	—	—	1.5748×10^{-2}	—	6.0288×10^{-3}	—
80	—	—	1.7906×10^{-3}	3.1367	1.1862×10^{-5}	7.1701
160	—	—	1.2477×10^{-4}	3.8431	1.8111×10^{-7}	7.8526
320	1.1886×10^{-3}	—	7.6455×10^{-6}	4.0285	6.9406×10^{-10}	8.0276
640	2.9035×10^{-4}	2.0334	4.7125×10^{-7}	4.0201	2.6749×10^{-12}	8.0195
1280	7.211×10^{-5}	2.0095	2.9322×10^{-8}	4.0064	1.0328×10^{-14}	8.0211

(4) 非定常一维对流扩散方程的迎风 PDS 以及中心 4 阶和 8 阶精度双重摄动差分格式 (PDS), 这些格式的半离散形式均可表示为

$$\frac{d\varphi_i}{dt} = C_{i+1}(\varphi_{i+1} - \varphi_i) + C_{i-1}(\varphi_{i-1} - \varphi_i), C_{i\pm 1} \geq 0 \quad (26)$$

因此它们均为三结点高阶 TVD 格式, 对网格 Reynolds 数的任意值为不振荡格式. 然而对一维双曲守恒律同理对对流扩散方程, Harten^[29] 已证明三结点 TVD 格式的精度不会超过二阶. 可见对流 - 扩散方程离散 MBS 耦合流体动力学的意义和好处, 总之, 众多的摄动差分格式 (PDS) 中, 六阶迎风 PDS, 双重摄动四阶和八阶中心 PDS 最实用和最有价值^[96,97,112].

(5) 当扩散项离散 MBS 取二阶中心差分格式, 而对流项离散 MBS 取多结点 (如五结点) 高阶迎风格式时, 对流扩散耦合离散的 PDS 仍然是 MBS 乘以 NPRF, 即乘以网格 Reynolds 数的简单多项式. 对一维对流扩散方程的五结点迎风 MBS 进行上、下游双重摄动重构、得到的两组 PDS 分别是^[99,100]

$$\begin{aligned} & \frac{u_i}{16\Delta x} G_{u1}^+ [(1 + \alpha)(3u_{i+1} - 3u_i) + \\ & (1 - \alpha)(-u_{i+2} + 7u_{i+1} - 6u_i)] - \\ & \frac{\nu}{\Delta x^2} (u_{i+1} - u_i) + \\ & \frac{u_i}{16\Delta x} G_{u2}^- [(1 - \alpha)(-3u_{i-1} + 3u_i) + \\ & (1 + \alpha)(u_{i-2} - 7u_{i-1} + 6u_i)] - \\ & \frac{\nu}{\Delta x^2} (u_{i-1} - u_i) = 0 \end{aligned} \quad (26a)$$

和

$$\begin{aligned} & \frac{u_i}{12\Delta x} G_{u1}^+ [-(1 - \alpha)u_{i+2} + \\ & 4(2 - \alpha)u_{i+1} + (3\alpha - 7)u_i] - \\ & \frac{\nu}{\Delta x^2} (u_{i+1} - u_i) + \\ & \frac{u_i}{12\Delta x} G_{u2}^- [(1 + \alpha)u_{i-2} - \\ & 4(2 + \alpha)u_{i-1} + (3\alpha + 7)u_i] - \\ & \frac{\nu}{\Delta x^2} (u_{i-1} - u_i) = 0 \end{aligned} \quad (26b)$$

其中 NPRF G_{u1}^+ , G_{u1}^- , G_{u2}^+ 和 G_{u2}^- 均为网格 Reynolds 数的简单多项式. 必须指出, PDS (26a) 和 (26b) 均包含一些绝对稳定格式, 即它们稳定的临界网格 Reynolds 数 R_{cri} 为无穷大, 见表 4 和文献 [99, 100]; 然而所有多结点迎风高精度 MBS 均为条件稳定格式 (参见表 1), 多结点迎风 MBS 全域重构的 PDS 也均为条件稳定格式, 见表 4, 用五结点绝对稳定 PDS 求解 Burgers 方程, 网格很粗也不产生振荡解; 用五结点条件稳定和绝对稳定 PDS 求解线性对流扩散方程均可达到各自的精度阶. 文献 [99, 100] 指出高算法对多结点格式, 像 3-UDS (三阶迎风差分格式) 和 QUICK 格式这样的迎风格式同样有效, 相比 3-UDS 和 QUICK 格式两类高迎风格式 (GUDS) 具有更高的精度、更大的稳定范围. 一些双重摄动 (DP) 五结点迎风差分格式为绝对稳定的理论基础及物理原因完全与双重摄动三结点中心格式为绝对稳定的理论基础及物理原因相类似, 这里不再重述. 应该提到, 文献 [99, 100] 利用“符号不变”的稳定性分析方法^[6] 数值计算了五结点迎风摄动格式 (PDS) 为稳定的临界网格 Reynolds 数 R_{cri} 的大小; 例如对高 - QUICK 格

式^[99], 全域 (单重) 摄动高 - QUICK 格式和 QUICK 格式为稳定的条件是满足如下不等式关系

$$-\frac{8}{7} \leq R_{\Delta}(1 + a_1 R_{\Delta} + a_2 R_{\Delta}^2 + \cdots + a_N R_{\Delta}^N) \leq \frac{8}{3} \quad (26c)$$

$(N = 1, 2, \dots, 6)$

区分上下游双重摄动高 - QUICK 格式为稳定的条件是满足如下两个不等式关系

$$R_{\Delta}(1 + b_1 R_{\Delta} + b_2 R_{\Delta}^2 + \cdots + b_N R_{\Delta}^N) \leq \frac{8}{3} \quad (26d)$$

$$R_{\Delta}(1 + c_1 R_{\Delta} + b_2 R_{\Delta}^2 + \cdots + c_N R_{\Delta}^N) \geq -\frac{8}{7} \quad (26e)$$

其中 R_{Δ} 为网格 Reynolds 数, a_N , b_N 和 c_N 为摄动重构运算求出的已知数. 数值求解^[99]式 (26c) 证实全域摄动高 - QUICK 格式和 QUICK 格式为稳定的临界网格 Reynolds 数 R_{cri} 为有限

值, $2 < R_{\text{cri}} < 3$, 见表 4. 数值求解式 (26d) 和 (26e) 证实双重摄动 (DP) 三阶和七阶精度高 - QUICK 格式稳定的 R_{cri} 为无穷大. 事实上, 全域摄动高 - QUICK 格式和 QUICK 格式的 R_{cri} 同时受到上界和下界的限制. 由式 (26e) 可知 R_{cri} 只能是有限值; 而双重摄动高 - QUICK 格式的 R_{cri} , 在上游受到下界限制, 在下游受到上界限制, 见式 (26d) 和 (26e); 很显然, $R_{\text{cri}} = \infty$ 应是同时满足式 (26d) 和 (26e) 的解. 可以推断, 对结点更多的单重摄动 (SP) 和双重摄动 (DP) 高精度迎风 and 中心格式 (PDS), 它们为稳定的临界网格 Reynolds 数 R_{cri} 具有类似于五结点 PDS 的特性. 此外应指出, 对流项离散使用多结点和使用三结点, 压力项离散的 PDS 彼此相同、时间项离散的 PDS 彼此也相同.

表 4 一维对流扩散方程的多结点迎风型 MBS 和相应的单重和双重摄动 (SP, DP) 差分格式 (PDS) 的精度阶和格式稳定的临界网格 Reynolds 数 R_{cri} ^[99,100]

格式	3US-2CS	SP-PDS			DP-PDS		
精度阶	2	3	5	7	3	5	7
R_{cri}	3	2.16	2.2	2.02	∞	3.88	∞
格式	QUICK-2CS	SP-PDS			DP-PDS		
精度阶	2	3	5	7	3	5	7
R_{cri}	8/3	2.21	2.33	2.12	∞	3.87	∞

注: 表中 3US-2CS 诸对流项离散为三阶迎风格式而扩散项离散为二阶中心格式时, 对流扩散方程离散的精度为二阶.

(6) 对可压缩守恒型 NS 方程组离散 MBS 的数值摄动重构, 大体类似于不可压 MBS 的摄动重构并无实质困难, 见文献 [107~109, 115]

(7) 能量方程离散的 PDS 则是能量方程离散的 MBS 乘以网格 Peclet 数 $P_{\Delta x}$ 的简单多项式, $P_{\Delta x} = \frac{u\Delta x}{D}$, D 为扩散系数, 导出能量方程 PDS 的方法与导出 NS 动量方程 PDS 的方法相类似.

4 NS 方程组离散有限体积 MBS 耦合流体力学的摄动有限体积格式 (PVS)

4.1 一般考虑

在 3.1 节中关于有限差分——数学基本格式 (FD-MBS) 通过数值摄动重构构建 PDS 的一般考虑, 同样适用于有限体积数学基本格式 (FV-MBS) 的数值摄动重构, 这里不再重复. FV 方法从积分方程出发, 因此数值离散近似分为两层 (或两步): 第 1 步是积分近似, 第 2 步是插值近似^[2]; 当插值近似根据数学方法给出时称作有限体积数学基本

格式 (MBS); FV 格式的整体精度阶为积分近似精度和插值近似精度中最低的精度. 积分近似最简单的是中点规则 (midpoint rule), 为二阶精度; 插值近似 MBS 中最简单的是一阶迎风和二阶中心差分格式. 应该指出, 在积分近似取中点规则为二阶精度的情况下, 通常也使用高阶插值近似, 如三阶 QUICK 格式, FROMM 格式, 文献使用标准解算例证实了二阶积分近似下插值近似高精度依然有提高计算精度的实际好处^[110~112].

4.2 可压缩 NS 动量方程组、有限体积离散的最简单 MBS 和摄动有限体积格式 (FVS)

可压缩 NS 方程组的积分形式为

$$\iiint_{\Omega} \frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} d\Omega + \iint_S \rho\varphi \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} ds = \iint_S \mu \text{grad}\varphi \cdot \mathbf{n} ds - \iint_S p \cdot \mathbf{n} ds + \iiint_{\Omega} q d\Omega \quad (27)$$

其中, φ 为标量流速. 在积分近似取中点规则时, 积

分方程 (27) 可化为

$$\left(\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t}\right)_p \Omega_p + \sum_{j=1}^J \left[m_{jf} \varphi_{jf} - \left(\mu \frac{\partial\varphi}{\partial\xi_j}\right)_{jf} S_{jf} + p_{jf} S_{jf} \right] = q_p \Omega_p \quad (28)$$

其中设 p 控制体有 J 个界面, jf 面是 p 控制体与相邻 jp 控制体之交界面, 参见图 2.

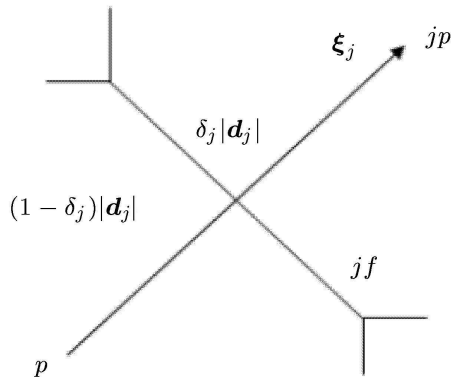


图 2 p 控制体, 相邻 jp 控制体, 交界面 jf 和局部坐标系

为了不使问题复杂化, 假设 p 和 jp 连线方向即 ξ_j 与交界面法向方向 \mathbf{n} 一致, 不一致的情况可采用 Mugaferiga 的办法处理 [2]. Ω_p 为 p 控制体体积, m_{jf} 为 jf 交界面质量通量

$$m_{jf} = \rho_{jf} \cdot \mathbf{u}_{jf} \cdot \mathbf{S}_{jf}, \quad \mathbf{S}_{jf} = S_{jf} \cdot \mathbf{n} \quad (29)$$

下标 jf 表示在交界面 jf 中心取值, \mathbf{S}_{jf} 为交界面面积矢量, \mathbf{n} 为 jf 交界面外法向单位矢量. 插值近似最简单 MBS 为一阶迎风和二阶中心格式, 因此有限体积最简单的 MBS 为

$$\Omega_p \left[\left(\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t}\right)_p^{n+1} - \left(\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t}\right)_p^n \right] + \sum_{j=1}^J \left\{ \frac{1}{2} m_{jf} [(1 + \alpha_j)\varphi_p + (1 - \alpha_j)\varphi_{jp}] \right\} + \sum_{j=1}^J \left\{ -\frac{\mu}{d_j^2} \mathbf{d}_j \cdot \mathbf{S}_{jf} (\varphi_{jp} - \varphi_p) + S_{jf} [\delta_j p_p + (1 - \delta_j) p_{jp}] \right\} + q_p \Omega_p = 0 \quad (30)$$

其中 $\alpha_j = \text{sgn}u_{jf}$; $d_j = |\mathbf{d}_j|$ 对方程 (28) 离散最简单 FV-MBS (30) 的数值摄动重构是把时间项系数 Ω_p , 对流项插值近似系数即通量 m_{jf} , 压力项插值近似式系数 1 重构为它们分别乘以 $d_j(d_j$ 为

结点 p 和结点 jp 连线的距离) 的幂级数; 幂级数 $d_j^m (m = 1, 2, \dots)$ 项的待定系数则利用空间分裂, 通过消除重构格式修正微分式截断误差诸项等技巧来求出. 有限体积重构与 3 节有限差分数值摄动重构处理相一致, 对时间项和压力项进行单独重构, 而对黏性扩散和对流项进行对流扩散耦合离散重构即统一重构, 因此 FV-MBS (30) 耦合流体动力学的最简单 PVS 为

$$\Omega_p \left[\left(\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t}\right)_p^{n+1} - \left(\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t}\right)_p^n \right] + \sum_{j=1}^J \left\{ \frac{1}{2} m_{jf} G_{uj} [(1 + \alpha_j)\varphi_p + (1 - \alpha_j)\varphi_{jp}] \right\} + \sum_{j=1}^J \left\{ \begin{aligned} & m_{jf} G_{cj} [\delta_j \varphi_p + (1 - \delta_j)\varphi_{jp}] \\ & m_{jf} [G_{cj}^+ (1 - \delta_j)\varphi_{jp} + G_{cj}^- \delta_j \varphi_p] \end{aligned} \right\} + \sum_{j=1}^J \left\{ \begin{aligned} & G_{pj} [\delta_j p_p + (1 - \delta_j) p_{jp}] \\ & G_{pj} [\delta_j p_p + (1 - \delta_j) p_{jp}] \\ & [G_{pj}^+ (1 - \delta_j) p_{jp} + G_{pj}^- \delta_j p_p] \end{aligned} \right\} - \frac{\mu}{d_j^2} \mathbf{d}_j \cdot \mathbf{S}_{jf} (\varphi_{jp} - \varphi_p) - q_p \Omega_p = 0 \quad (31)$$

其中, 数值摄动重构函数 (NPRF) G_{uj} , G_{cj} , G_{cj}^+ , G_{cj}^- , G_{pj} , G_{pj}^+ 和 G_{pj}^- 分别为

$$\begin{aligned} G_{uj} &= 1 + \sum_{m=1}^M a_m d_j^m \\ G_{cj} &= 1 + \sum_{m=1}^M b_m d_j^m \\ G_{cj}^+ &= 1 + \sum_{m=1}^M b_m^+ (\delta_j d_j)^m \\ G_{cj}^- &= 1 + \sum_{m=1}^M b_m^+ (1 - \delta_j)^m d_j^m \\ G_{pj} &= 1 + \sum_{m=1}^M C_m d_j^m \\ G_{pj}^+ &= 1 + \sum_{m=1}^M C_m^+ (\delta_j d_j)^m \\ G_{pj}^- &= 1 + \sum_{m=1}^M C_m^- (1 - \delta_j)^m d_j^m \end{aligned} \quad (32)$$

采用空间分裂, PVS (31) 空间部分第 j 个界面 (即 p 控制体与相邻 jp 控制体之交界面), 相应的数值摄动重构格式为式 (33), 格式 (33) 中略去了其它界面对外界面的干扰, 这是由于干扰项对所有界面求和的总和为零, 干扰项最终的摄动格式中并

不出现;为简略起见,在空间分裂摄动格式 (33) 中已把干扰项略去.

$$\frac{\mu}{d_j^2} \mathbf{d}_j \cdot \mathbf{S}_{jf} (\varphi_{jp} - \varphi_p) - \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{2} m_{jf} G_{uj} [(1 + \alpha_j) \varphi_p + (1 - \alpha_j) \varphi_{jp}] \\ m_{jf} G_{cj} [\delta_j \varphi_p + (1 - \delta_j) \varphi_{jp}] \\ m_{jf} [G_{cj}^+ (1 - \delta_j) \varphi_{jp} + G_{cj}^- \delta_j \varphi_p] \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} G_{pj} [\delta_j p_p + (1 - \delta_j) p_{jp}] S_{jf} \\ G_{pj} [\delta_j p_p + (1 - \delta_j) p_{jp}] S_{jf} \\ [G_{pj}^+ (1 - \delta_j) p_{jp} + G_{pj}^- \delta_j p_p] S_{jf} \end{array} \right\} + q_p \Omega_p = 0 \quad (33)$$

根据第 3 节中所述数值摄动重构诸原则,可对 PVS (33) 诸项顺序进行重构,对流扩散耦合离散重构,压力项离散单独重构,最后是时间项离散的单独重构.

4.2.1 对流扩散耦合离散的摄动有限体积格式 (PVS)

格式 (33) 中对流扩散项耦合离散的重构格式,即格式 (33) 中的前两项,其实正是对流扩散积分方程离散的最简单 FV-MBS 耦合流体动力学的 PVS,将式 (32) 中 $G_{uj}, G_{cj}, G_{cj}^+, G_{cj}^-$ 代入格式 (33) 中的前两项中,再将 φ_p 和 φ_{jp} 对交界面 S_{jf} 中心取 Taylor 展开,利用冻结通量 m_{jf} 条件下导出的高阶导数 $\frac{\partial^m \varphi}{\partial \xi_j^m}$ 与界面值 φ_{jf} 之间的如下高阶流体力学线性关系式

$$\frac{\partial^m \varphi}{\partial \xi_j^m} = \left(\frac{m_{jf}}{\mu S_{jf}} \right)^m \varphi_{jf} = \left(\frac{u_{jf}}{\gamma} \right)^m \varphi_{jf} \quad (34)$$

通过消除格式 (33) 前两项修正微分式截断误差诸项,即令修正微分式 d_j^m 诸项系数为零求得^[94,95,98]

$$G_{uj} = 1 + \sum_{m=1}^M \frac{1}{(m+1)!} (R_{dj} \operatorname{sgn} m_{jf})^m \quad (35)$$

$$R_{dj} = \frac{u_{jf} d_j}{\gamma}$$

$$G_{cj} = 1 + \frac{1}{2} (2\delta_j - 1) R_{dj} + \frac{1}{3!} (1 - 6\delta_j + 6\delta_j^2) R_{dj}^2 - \frac{1}{4!} (1 - 14\delta_j + 36\delta_j^2 - 24\delta_j^3) R_{dj}^3 + \frac{1}{5!} (1 - 30\delta_j + 150\delta_j^2 - 240\delta_j^3 + 120\delta_j^4) R_{dj}^4 \quad (36)$$

当 $\delta_j = \frac{1}{2}$ 时

$$G_{cj} = 1 - \frac{1}{12} R_{dj}^2 + \frac{1}{120} R_{dj}^4 \quad (37)$$

这里,通过消除格式 (33) 前两项修正微分式截断误差上游诸项和下游诸项,即令修正微分式 $(\delta_j d_j)^m$ 诸项系数为零以及 $(1 - \delta_j)^m d_j^m$ 诸项系数为零,求得

$$G_{cj}^+(M) = 1 + \sum_{m=1}^M \frac{(-1)^m}{1 - \delta_j} \left[\frac{1}{m!} - \frac{2m+1}{(m+1)!} \delta_j \right] \delta_j^m R_{dj}^m \quad (38)$$

$$G_{cj}^-(M) = 1 + \sum_{m=1}^M \frac{1}{\delta_j} \left[\frac{2m+1}{(m+1)!} \delta_j - \frac{m}{(m+1)!} \right] \times (1 - \delta_j)^m R_{dj}^m \quad (39)$$

推导 G_{cj}^+ 和 G_{cj}^- 公式时,所说上游和下游是相对于交界面 S_{jf} 而言的,如若 $u_{jf} > 0$ 则结点 p 为上游,结点 jp 为下游;若 $u_{jf} < 0$ 则结点 p 为下游,结点 jp 为上游.

4.2.2 压力项离散的摄动有限体积格式 (PVS)

由第 3.2 节中数值摄动重构原则可知,压力项插值近似 MBS 的数值摄动重构可单独进行,且相应于对流扩散项耦合重构的全域 (同时利用 p 控制体结点和相邻 jp 控制体结点) 重构和区分上、下游的双重摄动重构,压力项插值近似的 PVS 应为

$$p_{jf} = G_{pj} [\delta_j p_p + (1 - \delta_j) p_{jp}] \quad (40)$$

$$p_{jf} = G_{pj}^+ (1 - \delta_j) p_{jp} + G_{pj}^- \delta_j p_p \quad (41)$$

G_{pj}, G_{pj}^+ 和 G_{pj}^- 的表达式见式 (32),将 G_{pj}, G_{pj}^+ 和 G_{pj}^- 分别代入 PVS (40) 和 (41),并将 p_p 和 p_{jp} 对 jf 交界面中心取 Taylor 展开,再利用冻结界面通量条件下压力界面值 p_{jf} 与流速界面值 u_{jf} 之间的关联以及 u_{jf} 与黏性导数 $\left(\frac{\partial u}{\partial \xi_j} \right)_{jf}$ 之间的关联,由此导出如下压力的高阶流体力学线性关系式

$$\left(\frac{\partial^m p}{\partial \xi_j^m} \right)_{jf} = \left(\frac{m_{jf}}{\mu S_{jf}} \right)^m p_{jf} = \left(\frac{u_{jf}}{\gamma} \right)^m p_{jf} \quad (42)$$

通过消除重构格式 (40) 修正微分式的截断误差诸项,即在修正微分项中令 d_j^m 诸项系数为零可求出

式 (32) 中的 C_m , 因此 G_{pj} 为

$$\begin{aligned} G_{pj} = & 1 - \frac{1}{2}\delta_j(1-\delta_j)R_{dj}^2 - \frac{1}{6}\delta_j(1-\delta_j)(1-2\delta_j)\times \\ & R_{dj}^3 + \frac{1}{24}\delta_j(1-\delta_j)(6\delta_j-1-6\delta_j^2)R_{dj}^4 + \\ & \frac{1}{120}\delta_j(1-\delta_j)(1-2\delta_j)(22\delta_j-20\delta_j^2-1)\times \\ & R_{dj}^5 \stackrel{\delta_j=\frac{1}{2}}{=} 1 - \frac{1}{8}R_{dj}^2 + \frac{1}{192}R_{dj}^4 \end{aligned} \quad (43)$$

类似地, 通过消除重构格式 (41) 修正微分式的截断误差诸项, 即在修正微分式中分别令 $(\delta_j d_j)^m$ 和 $(1-\delta_j)^m d_j^m$ 项的系数为零可求出式 (32) 中的 C_m^+ 和 C_m^- , G_{pj}^+ 和 G_{pj}^- 为

$$\begin{aligned} G_{pj}^+ = & 1 - \delta_j R_{dj} + \frac{1}{2}(\delta_j R_{dj})^2 - \frac{5}{12}(\delta_j R_{dj})^3 + \\ & \frac{7}{24}(\delta_j R_{dj})^4 - \frac{2}{15}(\delta_j R_{dj})^5 \end{aligned} \quad (44)$$

$$\begin{aligned} G_{pj}^- = & 1 - (1-\delta_j)R_{dj} + \\ & \frac{1}{2}(1-\delta_j)^2 R_{dj}^2 - \frac{5}{12}(1-\delta_j)^3 R_{dj}^3 + \\ & \frac{7}{24}(1-\delta_j)^4 R_{dj}^4 - \frac{2}{15}(1-\delta_j)^5 R_{dj}^5 \end{aligned} \quad (45)$$

4.2.3 时间项离散的摄动有限体积格式 (PVS)

时间项离散的 PVS, 与空间分裂第 j 个界面相应的时间项离散 PVS 为

$$\frac{1}{\Delta t} G_{tj}(\Delta t) \Omega_p \left[\left(\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} \right)^{n+1} - \left(\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} \right)^n \right] \quad (46)$$

$$G_{tj} = 1 + \sum_{m=1}^M T_{jm} \Delta t^m \quad (47)$$

将式 (47) 代入重构格式 (46), 将 $\left(\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} \right)^{n+1}$ 对 n 时间层取 Taylor 展开, 再利用冻结通量条件下, 时间导数 $\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t}$ 与界面值 φ_{jf} 之间的关联以及 φ_{jf} 与扩散导数 $\frac{\partial\varphi_{jf}}{\partial\xi_j}$ 之间的关联, 由此推出的如下时间项的高阶流体力学线性关系式

$$\frac{\partial^m(\rho\varphi)}{\partial t^m} = \left(\frac{u_{jf}^2}{\gamma} \right)^{m-1} \frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} \quad (48)$$

通过消除重构格式 (46) 修正微分式之截断误差诸项, 即在修正微分式中令 Δt^m 诸项系数为零

可求出 T_{jm} , 于是有

$$\begin{aligned} G_{tj}(\Delta t) = & 1 - \frac{1}{2}|R_{dj}||\lambda_j| + \frac{1}{12}(\lambda_j R_{dj})^2 - \\ & \frac{1}{720}(\lambda_j R_{dj})^4 + \frac{1}{42 \times 720}(\lambda_j R_{dj})^6 \end{aligned} \quad (49)$$

其中 $R_{dj} = u_{jf} d_j / \gamma$, $\lambda_j = u_{jf} \Delta t / d_j$, λ_j 为网格 CFL 数. 时间项离散的 PVS 因此为

$$\frac{1}{\Delta t} \Omega_p \prod_{j=1}^J G_{tj}(\Delta t) \left[\left(\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} \right)^{n+1} - \left(\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} \right)^n \right] \quad (50)$$

4.2.4 源项离散的摄动有限体积格式 (FVS)

与有限差分方法中对源项离散 MBS 的摄动处理 (见节 3.2.4) 一致, 将对流 - 扩散 - 源项三项耦合离散的 MBS 统一加以摄动重构, 为此可在对流 - 扩散耦合离散 FVS, 即格式 (33) 的前两项加上摄动重构源项, 即有

$$\begin{aligned} & \left\{ R_{jf} G_{uj} \left[\frac{1+\alpha_j}{2} \varphi_p + \frac{1-\alpha_j}{2} \varphi_{jp} \right] \right. \\ & (\varphi_{jp} - \varphi_p) - \left. \left\{ R_{jf} G_{cj} [\delta_j \varphi_p + (1-\delta_j) \varphi_{jp}] \right. \right. \\ & \left. \left. \left\{ R_{jf} [G_{cj}^+ (1-\delta_j) \varphi_{jp} + G_{cj}^- \delta_j \varphi_p] \right\} \right\} + \right. \\ & \left. \left\{ \begin{array}{l} G_{usj} S_{pj} d_j \\ G_{csj} S_{pj} d_j \\ \frac{1}{2} [G_{csj}^+ \delta_j + G_{csj}^- (1-\delta_j)] S_{pj} q_{pj} \end{array} \right\} \right\} \end{aligned} \quad (51)$$

其中 $R_{jf} = \frac{u_{jf} d_j}{\gamma}$, $S_{pj} = \frac{d_j}{u d_j S_{jf}} q_{pj} \Omega_p$, $\sum_{j=1}^J q_{pj} = q_p$

$$\begin{aligned} G_{usj} = & 1 + \sum f_m d_j^m, \\ G_{csj} = & 1 + \sum g_m d_j^m \\ G_{csj}^+ = & \sum g_m^+ (\delta_j d_j)^m, \\ G_{csj}^- = & 1 + \sum g_m^- (1-\delta_j)^m d_j^m \end{aligned} \quad (52)$$

将 $G_{uj}, G_{cj}, G_{cj}^+, G_{cj}^-, G_{usj}, G_{csj}, G_{csj}^+$ 和 G_{csj}^- 代入摄动重构格式 (51), 将 φ_{jp} 和 φ_p 对交界面取 Taylor 展开, 利用冻结通量和源项条件下导出的如下源项速度高阶流体力学线性关系式

$$\frac{\partial^m \varphi}{\partial \xi_j^m} = \left(\frac{m_{jf}}{\mu S_{jf}} \right)^m \varphi_{jf} - \left(\frac{m_{jf}}{\mu S_{jf}} \right)^{m-1} S_{pj} \quad (53)$$

通过消除重构格式 (51) 修正微分式截断误差诸项, 推出 G_{uj}, G_{cj}, G_{cj}^+ 和 G_{cj}^- 与相应的 $G_{usj}, G_{cjs}, G_{cjs}^+$

和 G_{cjs}^- 存在相等关系, 即

$$\begin{aligned} G_{usj} &= G_{uj}, \quad G_{csj} = G_{cj} \\ G_{csj}^+ &= \frac{2(1-\delta_j)}{\delta_j} G_{cj}^+, \quad G_{csj}^- = \frac{2\delta_j}{1-\delta_j} G_{cj}^- \end{aligned} \quad (54)$$

将式 (52) 和式 (54) 代入格式 (51) 得到对流 - 扩散 - 源项 3 项耦合离散的 PVS, 也可写成如下的形式

$$\left\{ \begin{array}{l} G_{uj}^{-1}(\varphi_{jp} - \varphi_p) \\ G_{cj}^{-1}(\varphi_{jp} - \varphi_p) \\ \frac{1}{G_{cj}^+}(\varphi_{jp} - \varphi_l) + \frac{1}{G_{cj}^-}(\varphi_l - \varphi_p) \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} R_{dj} \left(\frac{1+\alpha_j}{2} \varphi_p + \frac{1-\alpha_j}{2} \varphi_{jp} \right) \\ R_{dj} (\delta_j \varphi_p + (1-\delta_j) \varphi_{jp}) \\ R_{dj} (\delta_j \varphi_p + (1-\delta_j) \varphi_{jp}) \end{array} \right\} + S_{pj} q_{pj} \quad (55)$$

应当指出, 摄动体积格式 PVS (55) 和 PVS (51) 的关系, 相当于摄动差分格式 PDS (24) 和 PDS (20) 的关系; 对二维和三维有限差分及多界面有限体积离散情况, 当格式使用 PVS (51) 和 PDS (20) 形式即使用对流通量修正时, NS 方程的 PVS 和 PDS 中应包含其他方向贡献项 (未知), 即应包含类似于式 (24b) 的交叉贡献项. 当格式使用 PVS(55) 和 PDS(24) 形式即使用黏性通量修正时, NS 方程的 PVS 和 PDS 中没有未知的交叉方向贡献项, 因为所有其他方向贡献的总和恒为零, 见式 (24c).

4.2.5 NS 积分方程的广义源项及其摄动有限体积格式 (PVS)

如果将界面法向速度黏性项以外的其他黏性项和压力界面值及源项等合起来定义为 NS 积分方程的广义源项, 则 NS 积分方程有限体积离散的 PFV 就是格式 (51) 或格式 (55), 此时格式 (51) 和 (55) 中的源项 $S_{pj} q_{pj}$ 应指广义源项. 由于对流 - 扩散 - 广义源项三项耦合离散的 PVS 形式简洁, 且数值摄动重构函数 (NPRF) 就是对流扩散二项耦合离散的 NPRF, 因此广义源项处理和相应的 NS 积分方程离散的 PVS 是很有用的.

4.3 小结

以上在有限体积方法积分近似取中点规则

(为二阶精度) 的前提下, 考察了最简单插值近似 MBS(一阶迎风和二阶中心格式) 耦合流动动力学的 PVS, 主要结论如下:

(1) 对流 - 扩散耦合插值近似的 PVS 和压力项插值近似的 PVS 是相应 MBS 乘以 NPRF, 即乘以网格 Reynolds 数 R_{dj} 的简单多项式. 当 NPRF $G_{cj}, G_{cj}^+, G_{cj}^-, G_{pj}, G_{pj}^+$ 和 G_{pj}^- 截止到 R_{dj}^M 时, 在速度和压力高阶流体力学线性关系式 (34) 和 (42) 成立的条件下, 上述中心 PVS 为 $(M+2)$ 阶精度; 而当 NPRF G_{uj} 截止到 R_{dj}^M 时, 对流扩散耦合插值近似的迎风 PVS 为 $(M+1)$ 阶精度. 时间项离散的 PVS 是相应 MBS 乘以 $\lambda_j R_{dj}$ 的简单多项式, $\lambda_j = |u_{jp} \Delta t|/d_j$ 为网格 CFL 数, 当 G_t 截止到 $(R_{dj} \lambda_j)^M$ 时, 在时间项高阶流体力学线性关系式 (48) 成立的条件下, 时间项 PVS 为 $(M+1)$ 阶精度.

(2) 对流扩散项耦合插值近似的 PVS 其实就是对流扩散方程有限体积离散插值近似的 PVS. 值得指出, 有限体积迎风 NPRF G_{uj} (式 (35)) 与有限差分迎风 NPRF G_{ux} (式 (8)) 完全一致. 已知迎风高阶 PDS 只使用三结点, 且为绝对稳定格式; 迎风高阶 PVS 同样只使用控制体结点和相邻控制体结点, 且为绝对正型格式; 即迎风 PVS 为正型的临界网格 Reynolds 数 R_{cri} 为无穷大. 特别是两相邻结点到界面的距离因子 δ_j 不出现在迎风 PVS 中, 因此迎风 PVS 既适用于等步长也适用于变步长, 这一性质使迎风高阶 PVS 很适合于非结构以及结构 - 非结构混合网格设计. 进而考虑到常用的迎风三阶 QUICK 格式, 格式为正型的 R_{cri} 仅约为 8/3, 且要求等步长网格设计; 相比之下, 迎风高阶 PVS 无疑具有绝对的优势.

(3) 对流扩散积分方程有限体积方法的中心 PVS, 全域摄动 (单重摄动) 重构时中心型 PVS 为条件正型格式. 由 NPRF G_{cj} (式 (37)) 不难推出, 二阶中心格式 (2CVS)、单重摄动四阶和六阶精度中心 PVS 为正型的临界网格 Reynolds 数 R_{cri} , 分别为 2.0, 4.2 和 2.5. 区分上游和下游的摄动重构 (即双重摄动重构) 得到的中心 PVS, 由重构函数 G_{cj}^+ 和 G_{cj}^- (式 (38) 和 (39)) 不难推出, 其中一些 (奇数阶精度 PVS) 为绝对正型格式, 即格式为正型的 R_{cri} 为无穷大. 例如, 插值近似精度为三阶和五阶精度的双重摄动中心 PVS 为

$$\sum_{j=1}^J \left\{ \left\{ \frac{\mu}{d_j^2} \mathbf{d}_j \cdot \mathbf{S}_{jf} - m_{jf} \left[(1 - \delta_j) - \left(1 - \frac{3}{2} \delta_j \right) \delta_j R_{\Delta x} \right] \right\} \varphi_{jp} - \left\{ \frac{\mu}{d_j^2} \mathbf{d}_j \cdot \mathbf{S}_{jf} + m_{jf} \left[\delta_j + \left(\frac{3}{2} \delta_j - \frac{1}{2} \right) (1 - \delta_j) R_{\Delta x} \right] \right\} \varphi_p \right\} = 0 \quad (56)$$

$$\sum_{j=1}^J \left\{ \left\{ \frac{\mu}{d_j^2} \mathbf{d}_j \cdot \mathbf{S}_{jf} - m_{jf} \left[(1 - \delta_j) - \left(1 - \frac{3}{2} \delta_j \right) \delta_j R_{dj} + \left(\frac{1}{2} - \frac{5}{6} \delta_j \right) (\delta_j R_{dj})^2 - \left(\frac{1}{6} - \frac{7}{24} \delta_j \right) (\delta_j R_{dj})^3 \right] \right\} \varphi_{jp} - \left\{ \frac{\mu}{d_j^2} \mathbf{d}_j \cdot \mathbf{S}_{jf} + m_{jf} \left[\delta_j + \left(\frac{3}{2} \delta_j - \frac{1}{2} \right) (1 - \delta_j) R_{dj} + \left(\frac{5}{6} \delta_j - \frac{1}{3} \right) (1 - \delta_j)^2 R_{dj}^2 + \left(\frac{7}{24} \delta_j - \frac{1}{8} \right) (1 - \delta_j)^3 R_{dj}^3 \right] \right\} \varphi_p \right\} = 0 \quad (57)$$

当 $\delta_j = 1/2$ 时, PVS (56) 和 (57) 分别简化为

$$\sum_{j=1}^J \left\{ \left[\frac{\mu}{d_j^2} \mathbf{d}_j \cdot \mathbf{S}_{jf} - \frac{1}{2} m_{jf} \left(1 - \frac{1}{4} R_{dj} \right) \right] \varphi_{jp} - \left[\frac{\mu}{d_j^2} \mathbf{d}_j \cdot \mathbf{S}_{jf} + \frac{1}{2} m_{jf} \left(1 + \frac{1}{4} R_{dj} \right) \right] \varphi_p \right\} = 0 \quad (58)$$

$$\sum_{j=1}^J \left\{ \left[\frac{\mu}{d_j^2} \mathbf{d}_j \cdot \mathbf{S}_{jf} - \frac{1}{2} m_{jf} \left(1 - \frac{1}{4} R_{dj} + \frac{1}{24} R_{dj}^2 - \frac{1}{192} R_{dj}^3 \right) \right] \varphi_{jp} - \left[\frac{\mu}{d_j^2} \mathbf{d}_j \cdot \mathbf{S}_{jf} + \frac{1}{2} m_{jf} \left(1 + \frac{1}{4} R_{dj} + \frac{1}{24} R_{dj}^2 + \frac{1}{192} R_{dj}^3 \right) \right] \varphi_p \right\} = 0 \quad (59)$$

对中心 PVS (56) 和 (57) 不难证明: 当 δ_j 分别满足 $1/3 < \delta_j < 2/3$ 和 $3/7 < \delta_j < 4/7$ 时, PVS (56) 和 (57) 中 φ_{jp} 和 φ_p 的系数对 R_{dj} 的任意值恒为正. 这就是说, 对均匀网格和 δ_j 偏离 $1/2$ 不大的非均匀网格, 三阶和五阶精度中心 PVS 为绝对正型格式, 即它们为正型的临界网格 Reynolds 数 R_{cri} 为无穷大^[98], 如表 5 所示; 相比之下, 常用的有限体积二阶中心格式 (如著名的 Jameson 格式^[26~28]) 为正型的 R_{cri} 约为 2; 双重摄动奇数阶高精度中心 PVS^[96,97] 无疑具有绝对的优势. 三阶和五阶精度中心 PVS 求解 Burgers 方程, 网格很粗时也不振荡, 它们求解一维线性对流扩散方程均达到了各自的精度阶^[98]. 这与绝对稳定中心 PDS 的情况相一致 (参见 3.4.3 节和文献 [96, 97]). Jameson 等^[26~28] 使用人工黏性的二阶精度有限体积中心格式已得到广泛的应用, 区分上、下游的双重摄动重构 PVS 不仅精度高于二阶, 且为绝对正型, 即 PVS 为正型的临界网格 Reynolds 数 R_{cri} 为无穷大, 这无疑为中心体积格式避免或减少使用人工黏性提供了一条实用和有效的途径. 可见, 对流扩散积分方程 PVS 的诸多格式中, 最有价值和最实

用的 3 个格式是 6 阶迎风 PVS, 双重摄动 3 阶和 5 阶中心 PVS^[98,112,115], 它们均为绝对正型体积格式, 在一维情况下, 它们均为高阶 TVD 格式, 这与最有价值和最实用的 3 个 PDS 情况类似.

表 5 给出了二阶中心体积格式 (2CVS), 单重和双重摄动 (SP 和 DP) 中心摄动体积格式 PVS 的精度阶和它们为正型格式的临界网格 Reynolds 数 $R_{cri}(\delta_j = 1/2)$ ^[98]

表 5 有限体积方法

格式	2CVS		SP-PVS		DP-PVS				
精度阶	2		4	6	3	4	5	6	7
R_{cri}	2		4.2	2.5	∞	3.4	∞	3.0	∞

(4) 压力项插值近似 MBS 和时间项离散 MBS 耦合流体动力学的 PVS, 它们与对流扩散项耦合重构的具体方式无关. 例如不论对流扩散耦合 MBS 的重构是全域 (单重) 摄动重构, 还是区分上下游双重摄动重构, 不论对流扩散耦合离散 MBS 是最简单的 MBS, 还是较复杂的 MBS (如对流项插值近似为三阶精度, 五结点迎风格式和 QUICK 格式等), 压力项的 PVS 形式同一, 时间项的 PVS 形

式同一.

(5) 当对流项插值近似 MBS 取多结点 (例如取迎风型 QUICK 格式五结点) 时, 相应的 PVS 同样是 MBS 乘以网格 Reynolds 数的简单多项式. 全域单重摄动重构 PVS 与 QUICK 格式均为条件正型格式, 区分上、下游双重摄动重构的 PVS, 其中有些是绝对正型格式, 这与多结点上、下游双重摄动重构差分格式 PDS, 其中一些为绝对稳定格式的情况大体一致, 这里不再重复.

(6) 对于能量方程, 能量积分方程离散的 PVS, 同样是能量积分方程离散的 MBS 乘以网格 Peclet 数 $P_{\Delta x}$ 的简单多项式, 这种情况与能量微分方程离散的 PDS 情形一致.

5 摄动差分格式 (PDS) 和摄动有限体积格式 (PVS) 的应用计算

有限差分 and 有限体积、高精度迎风型和中心型非线性 PDS 和 PVS 已用于计算模型方程、不可压缩流动、可压缩流动、液滴萃取传质和微通道两相流等, 均获得良好数值结果或与已有 Benchmark 解一致的数值结果 [92~118].

已有利用求解流动的计算, 对 NS 方程组离散 MBS 的摄动重构以及对有源项对流扩散方程离散 MBS 的摄动重构均采用了广义源项方法和源项方法, 而对压力项的计算则采用了压力修正方法, 即压力基 (pressure-based) SIMPLE 类修正方法 [121~123]. 顶盖驱动方腔流动 (图 3(a)) 计算是一个 Benchmark 问题 (如文献 [124~126]), 利用 PVS-SIMPLE 耦合求解不可压 NS 方程组的计算表明: 不论是迎风型 [113~115] 还是中心型 [95,115~118] 全域 (单重) 摄动重构 PVS, 使用结构还是非结构网格均可在较粗网格下获得与 Ghia 等 [124] 使用多重网格技术给出的 Benchmark 解相一致的数值结果 (如图 4~图 7). 图 4~图 7 是垂直中线水平流速、水平中线上垂直流速与 Benchmark 解的比较. 插值近似为六阶精度迎风型 PVS 与一阶迎风 MBS 相比, 全域绝对质量流残差 PVS 比 MBS 收敛快, 且残差振幅小 [114]. 利用条件稳定中心型 PVS 计算顶盖驱动方腔流的结果与迎风型 PVS 的数值结果一致; 垂直和水平中心线上的速度分布准确, 各种涡的细节算得很清楚 [115~118], 与 Ghia 等的结果较好地相符.

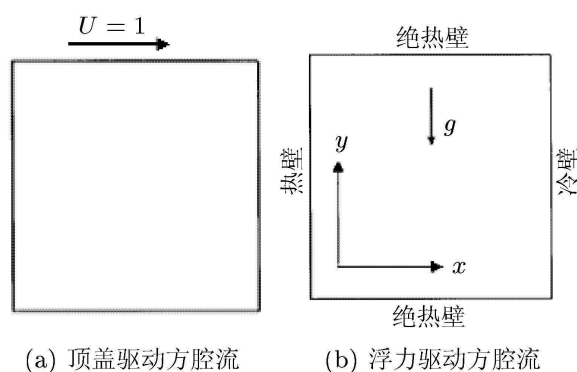


图 3

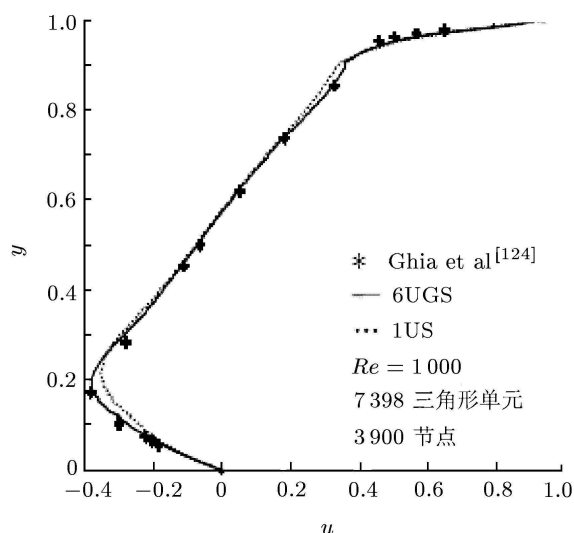


图 4 垂直中线水平流速 u 随垂直坐标 y 的变化 (非结构网格)

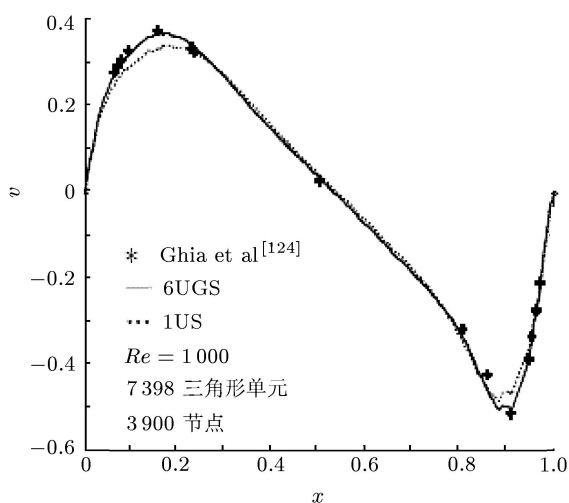


图 5 水平中线垂直流速 v 随水平坐标 x 的变化 (非结构网格)

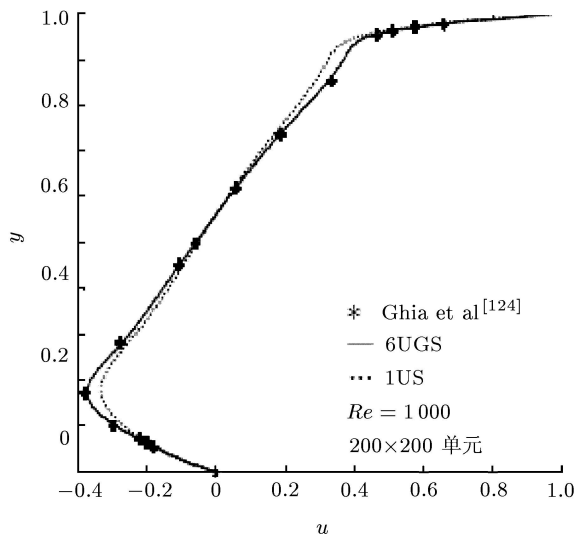


图 6 垂直中线水平流速 u 随垂直坐标 y 的变化 (结构网格)

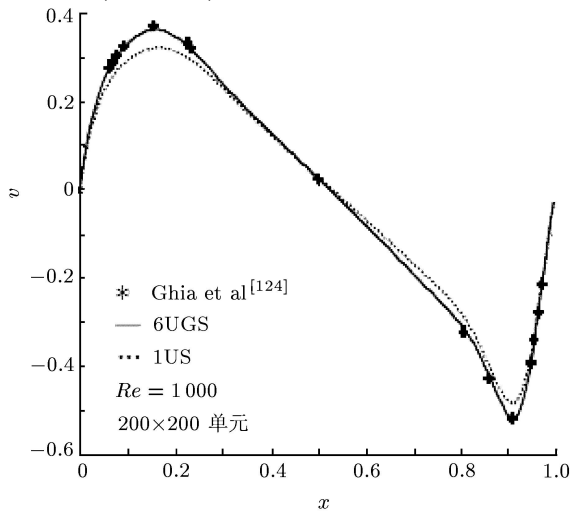


图 7 水平中线垂直流速 v 随水平坐标 x 的变化 (结构网格)

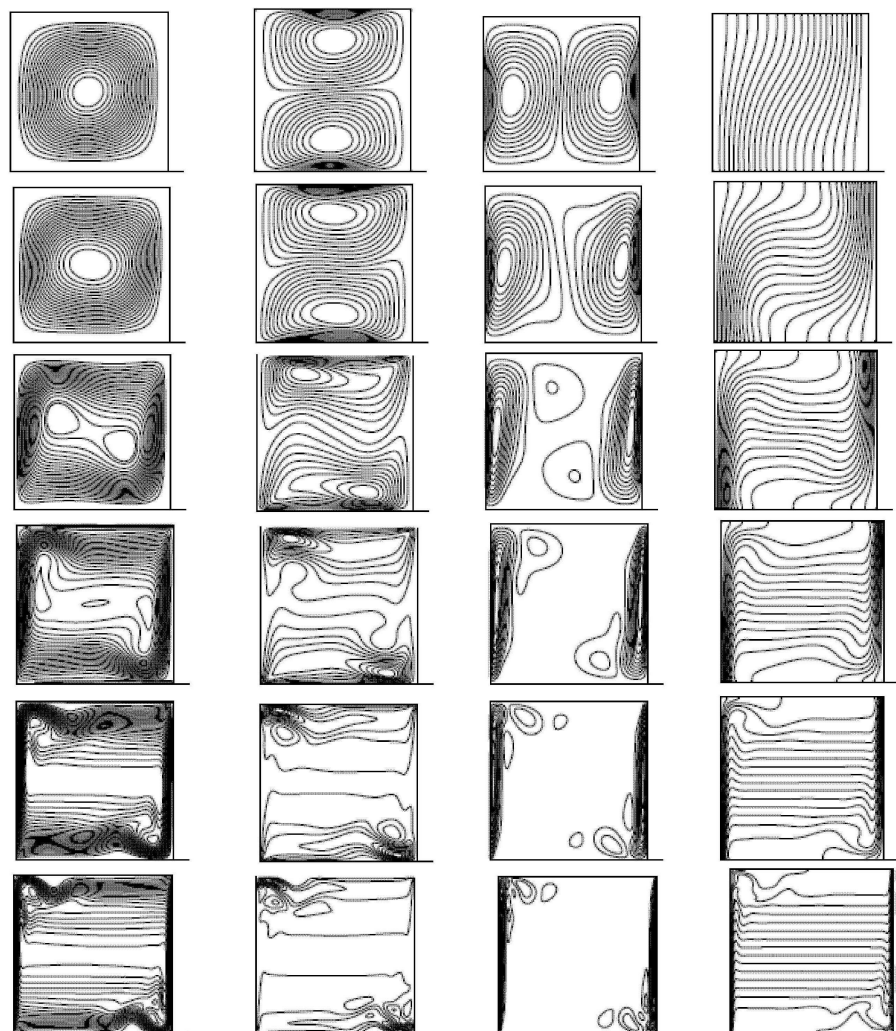
文献 [114, 115] 利用迎风型有限体积 PVS 耦合压力修正 SIMPLE 方法计算了自然对流的模型问题——浮力驱动方腔流动. 自然对流运动是具有重大科学意义和工程价值的复杂流动现象, 早在 30 年前浮力驱动方腔流动 (图 3(b)) 计算已被选作一个 Benchmark 解, 用以检验对流传热格式的正确性, 精度和有效性 (如文献 [127~129]). 有限体积迎风型 PVS 的公式不随步长的改变而改变, 故网格可任意地局部加密, 计算表明近壁区局部网格加密比均匀网格计算精度高且省机时. 文献 [114, 115] 计算提供了与其他 Benchmark 数值结果的详尽比较, 典型的数值比较如表 6 所示. 表 6 中给出了壁面上最大、最小和平均 Nusselt 数 (Nu) 以及最大最小 Nusselt 数对应的坐标值, 坐标值在表 6 中用小括号中的数表示. 计算的 Rayleigh(Ra) 数为 $10^3 \sim 10^8$, 包含了从层流转捩到湍流的整个流动领域; 8 种 Benchmark 数值结果彼此之间明显有所差异, 迎风型 PVS 与比较准确的自适应有限元 Benchmark 解相符最好. 图 8 是插值近似为六阶精度 PVS 算出的 Rayleigh(Ra) 数为 $10^3, 10^4, 10^5, 10^6, 10^7$ 和 10^8 等 6 种条件下浮力驱动方腔流的流线、水平速度 u 等值线、垂向速度 v 等值线和等温线. 对浮力驱动方腔流的表达, 该图在所有的 Benchmark 解中是最完善的, 且分辨率最好. 图 8 可以看出, 随 Ra 数的增大, 旋涡由中心涡到对称涡又到非对称涡的分裂和演化过程, 垂向壁热边界层的形成和水平壁边界层分离形成回流等复杂流动现象, 都十分清楚.

表 6 壁面最大、最小和平均 Nu 数及其坐标位置比较 [114,115]

Ra	Nu	文献 [13]	文献 [16]	文献 [14]	文献 [15]	文献 [17]	文献 [10] (FEM)	文献 [10] (DSC)	PFV
10^3	Max.	1.50(0.092)	—	—	1.47(0.109)	1.506 2(0.08956)	1.501(0.08)	1.444(0.091 7)	1.506 8(0.085)
	Min.	0.692(1.0)	—	—	0.623(1.0)	0.691 3(1.0)	0.691(1.0)	0.665(1.0)	0.691 1(0.995)
	Ave.	1.12	—	1.117	1.074	—	1.117	1.073	1.1178
10^4	Max.	3.53(0.143)	3.5	—	3.47(0.125)	3.530 5(0.1426)	3.579(0.13)	3.441(0.1333)	3.5387(0.145)
	Min.	0.586(1.0)	—	—	0.497(1.0)	0.585 0(1.0)	0.577(1.0)	0.528(1.0)	0.585 2(0.995)
	Ave.	2.243	—	2.243	2.084	—	2.254	2.155	2.247
10^5	Max.	7.71(0.08)	7.71	—	7.71(0.08)	7.708 4(0.0835 3)	7.945(0.08)	7.662(0.085)	7.7971(0.750)
	Min.	0.729(1.0)	—	—	0.614(1.0)	0.728 2(1.0)	0.698(1.0)	0.678(1.0)	0.730(0.995)
	Ave.	4.52	—	4.521	4.3	—	4.598	4.352	4.537
10^6	Max.	19.72(0.038)	17.0	—	17.46(0.039)	17.530 8(0.037 68)	17.86(0.03)	17.39(0.04)	18.451(0.035)
	Min.	0.989(1.0)	—	—	0.716(1.0)	0.984 5(1.0)	0.913 2(1.0)	0.903(1.0)	0.998 3(0.995)
	Ave.	8.8	—	8.806	8.743	—	8.976	8.632	8.951
10^7	Max.	—	30.0	—	30.46(0.024)	41.024 7(0.03899)	38.6(0.015)	31.02(0.02)	40.323 4(0.015)
	Min.	—	—	—	0.787(1.0)	1.379 9(1.0)	1.298(1.0)	0.997(1.0)	1.389 3(0.998)
	Ave.	—	—	16.40	13.99	—	16.656	13.86	16.589

表 6 壁面最大、最小和平均 Nu 数及其坐标位置比较^[114,115](续)

Ra	Nu	文献 [13]	文献 [16]	文献 [14]	文献 [15]	文献 [17]	文献 [10] (FEM)	文献 [10] (DSC)	PFV
2×10^7	Max.	—	—	—	—	—	48.84(0.015)	39.343(0.015)	51.919(0.011 6)
	Min.	—	—	—	—	—	1.437(1.0)	1.106(1.0)	1.5705(0.998)
	Ave.	—	—	—	—	—	19.97	15.46	19.939 0
4×10^7	Max.	—	—	—	—	—	61.69(0.015)	49.908(0.015)	68.190(0.008 3)
	Min.	—	—	—	—	—	1.59(1.0)	1.245(1.0)	1.760 0(0.998 0)
	Ave.	—	—	—	23.64	—	23.96	18.597	24.109 2
10^8	Max.	—	—	—	—	91.209 5(0.067)	91.16(0.010)	68.73(0.010)	99.824(0.008 3)
	Min.	—	—	—	—	2.044(1.0)	1.766(1.0)	1.428(1.0)	1.890 0(0.998 3)
	Ave.	—	—	—	—	—	31.486	23.67	31.058 9

(a) 流线 (b) 水平速度 u 等值线 (c) 垂向速度 v 等值线 (d) 等温线图 8 浮力驱动方腔流动形态随 Rayleigh(Ra) 数的演化, 瑞利数从上至下依次为 $Ra=10^3, 10^4, 10^5, 10^6, 10^7, 10^8$

文献 [116~118] 把四阶中心型有限体积 PVS 与 Level-Set 物质界面函数方法^[130,131]相结合, 计算了几个具有自由面的两相流问题: 二维溃坝流动; 二维矩形腔 (高为 4 宽为 1) 内互不相溶两液体 (初始交界面为水平面) 失稳 (Rayleigh-Taylor 不

稳定现象) 后, 界面变形运动的演化历史; 液滴萃取化工系统中液滴变形运动和传质过程, 以及界面张力梯度不均匀驱动的 Marangoni 对流效应对液滴变形运动和传质过程的影响, 系统模拟了雷诺数 ($Re = \rho UL/\mu$), 韦伯数 ($We = \rho U^2 L/\delta$), 弗劳

德数 ($Fr = U^2/gL$), 两液体密度比 ρ_1/ρ_2 和黏性系数比 μ_1/μ_2 对界面变形运动及传质过程的影响, 均与相关实验和其他较复杂的数值模拟结果相符, 说明有限体积中心型 PVS-Level Set 耦合方法的简单高效和高精度性质. 文献 [115, 116] 也将有限体积四阶中心型 PVS-Level Set 耦合算法用于计算微通道水-煤油两相流, 计算结果表明不同流速下微通道内煤油和水呈现不同的流型, 影响流型的主要因数是油水界面张力和惯性力; 计算了水、煤油和壁面三相交界处形成的接触角等, 均与实验很好相符. 类似于顶盖驱动方腔单相流动这一 Benchmark 问题, 他们用有限体积四阶精度中心型 PVS-LevelSet 耦合算法计算了顶盖驱动矩形腔 (腔高为 2, 宽为 1) 双重互不相溶两相流动, 数值模拟了两相流动的流型和两相界面的演变情况; 他们希望并建议将此两相流动选作一个 Benchmark 问题, 为两相流数值算法研究提供一种可行的验证模型, 因为迄今为止尚无评估两相流计算好坏的理论和数值方法, 不过他们并未列出可供比较的详细数值结果. 文献 [115] 提出了一种新的方案, 将可压缩 NS 方程组的动量和能量方程离散为一阶迎风 MBS, 而对可压缩 SIMPLE 压力修正方程离散的一阶迎风 MBS 进行数值摄动重构, 构建出压力修正方程离散的六阶精度迎风 PVS; 用 NS 一阶迎风 MBS 与修正压力六阶迎风 PVS 耦合算法进行了 Bumps 绕流流动的全速 (即亚、跨、超声速) 计算, 来流马赫数 M_∞ 取为 0.5, 0.675 和 1.4; 压力等值线, 壁面马赫数分布的计算结果均与文献结果一致, 证实这种耦合算法可用于亚、跨、超声速绕流计算, 但反射激波较粗, 说明激波计算数值耗散较大, 该算法有待进一步的改进和发展.

文献 [107~109] 对一维 Roe 格式 [18] 作了数值摄动重构, 给出的重构格式即 PDS 为

$$\frac{\partial u}{\partial t} \Big|_j + \frac{1}{\Delta x} (h_{j+1/2} - h_{j-1/2}) = \frac{1}{Re\Delta x^2} \cdot \left[\frac{1}{G_{u,j+1/2}} (u_{j+1} - u_j) - \frac{1}{G_{u,j-1/2}} (u_j - u_{j-1}) \right] \quad (60)$$

其中

$$h_{j+1/2} = \frac{1}{2} (f_{j+1} + f_j - |a_{j+1/2}| \Delta_{j+1/2} u), \quad f_j = \frac{1}{2} u_j^2, \quad \Delta_{j+1/2} u = u_{j+1} - u_j \quad (61)$$

$$a_{j+1/2} = \begin{cases} \frac{1}{\Delta_{j+1/2} u} (f_{j+1} + f_j), & \Delta_{j+1/2} \neq 0 \\ a(u_j), & \Delta_{j+1/2} = 0 \end{cases} \quad (62)$$

$$G_{u,j+1/2} = 1 + \sum_{m=1}^6 \frac{1}{(n+1)!} (R_{eu_{j+1/2}} \operatorname{sgn} u_{j+1/2})^n, \quad R_{eu_{j+1/2}} = \frac{\rho_{j+1/2} u_{j+1/2} \Delta x}{\mu_{j+1/2}} \quad (63)$$

文献 [107~109] 利用 PDS (60) 计算了 Burgers 方程和存在激波和膨胀波的一维可压缩流动 (马赫数 $M=2$ 和 4), 计算表明一维 Roe 格式的摄动重构 PDS 具有基本不振荡的性质, 且计算精度及对激波的分辨率均比一维 Roe 格式有明显的改进和提高, 特别是对膨胀波分辨率的提高更为明显, 如在激波管 Sjogreen 流动的计算中, 现有的多数高精度格式都出现了计算溢出现象 [131], 而 PDS 计算的稳定性和收敛性均居上乘.

文献 [115] 对雷诺平均 Navier-Stokes (RANS) 方程组的有限体积离散, 采用第 4 节所描述的广义源项方法对 AUSM 类格式中的 AUSMPW 格式 [24,25] 进行了数值摄动重构, 正如 4.3.4 节和 4.4 节所述, 摄动重构后无黏通量的对流项以及压力项均保持 AUSMPW 类格式中的形式; 而黏性二阶导数项 (如 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 v}{\partial y^2}, \frac{\partial^2 w}{\partial z^2}, \frac{\partial^2 k}{\partial x^2}$ 等) 均增加了摄动重构函数 $G_{uj}, G_{vj}, G_{wj}, G_{ej}, G_{kj}$ 和 G_{wj} , 这里 u, v 和 w 为 3 个正交坐标方向流速分量, e 为能量, k 和 w 为湍流模型中的湍能和比耗效率, 这些重构函数均具有式 (35) 的形式, 且均取到六阶精度. 文献 [115] 利用 AUSMPW 格式摄动重构后的迎风型 PVS, 使用三维结构非结构混合网格计算了 DLR-WB 组合体跨声速 ($M_\infty = 0.7533$)、有攻角 ($-0.304^\circ \sim 1.230^\circ$) 绕流, AUSMPW 摄动迎风 PVS 与原 AUSMPW 格式相比, 明显地改进了计算精度, 算出的 DLR-WB 升力曲线, 展向不同截面压力系数均比 AUSMPW 的数值结果与实验更好相符, 参见图 9 和图 10 所示. 图 9 和图 10 中 6UGS (6 阶迎风高的格式)-AUSMPW 即迎风型 PVS, DLR-WB 是德国 DLR 开发的翼身组合体 (WB) 模型, 后被美国 NASA 选作 WB 标准模型. 文献 [107, 108, 115] 对一维 Roe 格式、RANS 方程组离散 AUSMPW 格式的摄动重构, 将黏性项离散的二阶精度 MBS 除以相应的摄动重构函数, 如第 3 节和第 4 节所述; 在使用广义源项方法摄动重构的情况下, 这等效于对流项离散 MBS 乘以相应的摄动重构函数, 而对一维 Roe 格式和 AUSMPW 格式的耗散项不作任何改动. 从理论上说, 对格式中的耗散项部分亦作相应的适当改动, 因为这些格式对数值耗散的自适应

调节, 相当于调节 (修正) 对流 MBS 的修正微分式的截断误差耗散首项, 而对流项离散 MBS 与相应 PVS 的修正微分式的截断误差首项彼此并不相同.

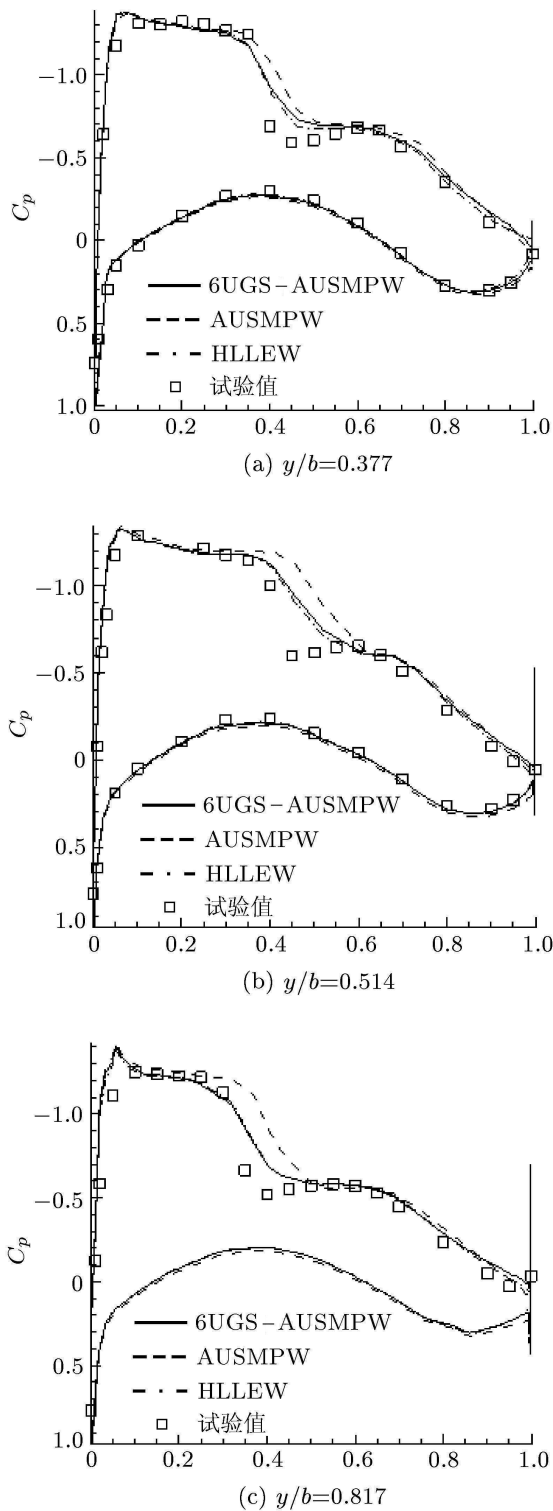


图 9 DLRWB 翼身组合体展向不同截面上下翼面压力系数 C_p 随弦向距离的变化及与实验值的比较 (攻角 1.230°)

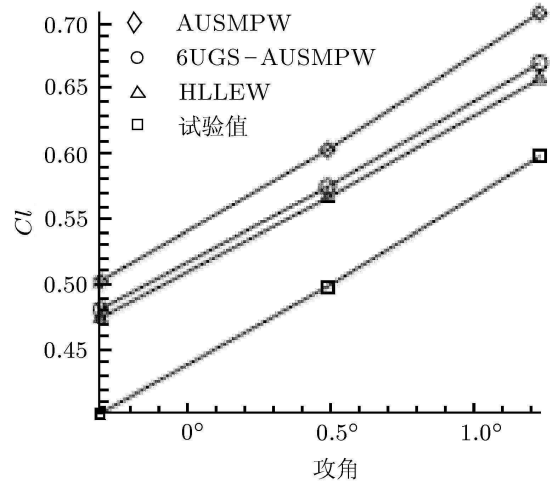


图 10 DLRWB 升力曲线计算值与实验值之比较

6 结束语

NS 方程组和对流扩散 (CD) 方程数值离散的摄动差分格式 (PDS) 和摄动有限体积格式 (PVS) 是 NS 方程组和 CD 方程离散数学基本格式 (MBS) 通过数值摄动重构耦合了流体动力学效应的格式; PDS 和 PVS 与 MBS 相比, 可更好地刻画流体的运动特性, 且精度更高稳定范围更大, 而 PDS 和 PVS 与 MBS 使用结点相同, 两者简单性相当, 这些都是 PDS 和 PVS 的突出优点. 按照通常的处理, 提高 MBS 精度需要扩充结点或引入新的待求量——结点导数 (紧致格式), 且随精度的提高, 格式的稳定范围减小 (见表 1). 不振荡 CFD 格式的构建通常需要利用通量限制器等人处理, 而不振荡 PDS 和 PVS 的构建完全依靠流体力学自身的规律和关系, 因此数值摄动法是构建高精度不振荡 CFD 格式的流体力学方法. PDS 和 PVS 数值模拟不少模型流动的成功, 说明 PDS 和 PVS 应更多地直接用于具有工程价值的复杂流动计算.

NS 方程组和 CD 方程离散 MBS 的数值摄动重构可构造一系列 PDS 和 PVS, 其中最价值和最有用的是如下 6 个格式: 六阶迎风 PDS 和有限体积 PVS, 双重摄动四阶和八阶绝对稳定中心 PDS, 双重摄动三阶和五阶绝对正型 PVS; 在一维情况下, 这 3 个 PDS 和 3 个 PVS 均为三结点高阶 TVD 格式. 这 6 种格式求解非线性 Burgers 方程和激波管 Sjogreen 流动时, 网格很粗仍不振荡. 但将它们直接用于求解存在激波的可压缩复杂三维流动时计算结果的图形是否锐利和逼真, 即是否具有高分辨率性质, 尚未看到相关的研究. 双重摄

动 (DP) 绝对稳定摄动中心差分格式 (PDS) 和绝对正型摄动中心有限体积格式 (PVS) 尚未用于计算复杂流动和工程问题, 这些都是值得进一步开展研究的工作。

一维 Roe 格式和三维 AUSMPW 格式的摄动重构格式 (即 PDS 和 PVS) 计算激波和三维翼身 (WB) 跨声速绕流的数值结果比原格式的结果有明显改进和提高的事实说明, 用最简单 PDS 和 PVS 替代已有高分辨率格式 (如通量差分分裂, 通量矢量分裂, AUSM, Jameson 格式, TVD 格式等) 中的最简单 MBS, 由此构建耦合流体动力学的高分辨率 PDS 和 PVS 应是一个很值得研究和发展的课题; 当然, 将 PDS 和 PVS 作为基础 (或起步) 格式、并直接进行自适应调节数值耗散、数值色散和数值群速度的人工处理, 构建高精度、高分辨率新型格式同样是值得研究和发展的课题。众多的计算实践告诉人们, 计算间断解需要引入一定且适当的数值耗散特性; MBS 耦合线性高阶流体动力学关系构建的 PDS 和 PVS, 虽具有绝对稳定或绝对正型的特性, 但是否具有间断解计算所需要的一定而适当的数值耗散特性, 仍待计算实践的证明。此外, 对流扩散项离散的数学基本格式 (MBS) 与相应的 PDS 和 PVS, 它们的修正微分式的截断误差耗散首项的含义彼此并不相同, 截断误差色散首项的含义彼此也不相同, 因此由它们构建对间断具有高分辨率、本质无振荡、波形无位错高性能格式的人为处理彼此也应有差异, 从理论和数值计算的角度, 研究并解决上述问题, 无疑具有理论意义和应用价值。最后提到数值摄动算法同样适用于其他一些数学物理方程, 例如气体动力论简化 Boltzmann 方程、磁流体力学方程、KdV-Burgers 方程等的 MBS 耦合物理动力学效应的解析重构。

参 考 文 献

- Laney C B. Computational Gasdynamics. Cambridge: Cambridge University Press, 1998
- Ferziger J H, Peric M. Computational Methods for Fluid Dynamics, 3rd edn. Berlin: Springer, 2002
- 刘儒勋, 舒其望. 计算流体力学的若干新方法. 北京: 科学出版社, 2003
- Pantankar S V. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. London: Taylor & Francis, 1980
- Tannehill J C, Anderson D A, Pletcher R H. Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer, 2nd edn. London: Taylor & Francis, 1997
- 陶文铨. 数值传热学 (第二版). 西安: 西安交通大学出版社, 2006
- 张涵信, 沈孟育. 计算流体力学 —— 差分方法的原理和应用. 北京: 国防工业出版社, 2003
- 阎超. 计算流体力学方法及应用. 北京: 北京航空航天大学出版社, 2006
- 徐文灿, 胡军. 计算流体力学. 北京: 北京理工大学出版社, 2009
- Spalding D B. A novel finite-difference formulation for differential expressions involving both first and second derivatives. *Int. J. Num. Methods Eng.*, 1972, 4: 551~562
- Lax P D, Wendroff B. Difference schemes for hyperbolic equations with high order of accuracy. *Comm. Pure Appl. Math.*, 1964, 17: 381~398
- MacCormack R W. The effect of viscosity in hypersonic impact cratering. AIAA paper 69-354, 1969
- Lenard B P. A stable and accurate convection modeling procedure based on quadratic upstream interpolation. *Comput. Math. Appl. Mech. Engrg.*, 1979, 19: 59~98
- Fromm J E. A method for reducing dispersion in convective difference schemes. *J. Comput. Phys.*, 1968, 3: 176~189
- 李新亮, 傅德薰, 马延文, 等. 高精度复杂流动数值模拟软件 Hoam-Open CFD 的开发及应用. 高性能计算发展与应用, 2007, 20(3): 52~58
- 姚征, 陈康民. CFD 通用软件综述. 上海理工大学学报, 2002, 24(2): 137~144
- Godunov S K. A difference method for the numerical calculation of discontinuous solutions of hydrodynamic equations. *Math. Sbornik*, 1959, 47: 271~306
- Roe P L. Approximate Riemann solvers, parameter vectors and difference schemes. *J. Comput. Phys.*, 1981, 43: 357~372
- Osher S. Shock modeling in aeronautics I. In: Morton K W, Baines M J eds. Numerical Methods for Fluid Dynamics. New York: Springer, 1982. 179~218
- Van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme V: a second-order sequel to Godunov's method. *J. Comput. Phys.*, 1979, 32: 101~136
- Steger J L, Warming R F. Flux vector splitting of the inviscid gasdynamics equations with application to finite difference methods. *J. Comput. Phys.*, 1981, 40(2): 263~293
- Van Leer B. Flux-vector splitting for the Euler equations. *Lecture Notes in Physics*, 1981, 170: 507~512
- Colella P, Woodward P. The piecewise parabolic method (PPM) for gas-dynamic simulations. *J. Comput. Phys.*, 1984, 54: 174~201
- Liou M S, Steffen J C. A new flux splitting scheme. *J. Comput. Phys.*, 1993, 107: 23~29
- Liou M S. Ten years in the making-AUSM family. AIAA paper 2001-2521, 2001
- Jameson A, Schmidt W, Turkel E. Numerical solutions of the Euler equations by finite volume methods using Runge-Kutta time-stepping schemes. AIAA paper 81-1259, 1981
- Swanson R C, Turkel E. Artificial dissipation and central difference schemes for the Euler and Navier-Stokes equations. AIAA paper 87-1107, 1987
- Jameson A. Analysis and design of numerical schemes for gas dynamics I: artificial diffusion, upwind biasing, limiters and their effects on accuracy and multigrid convergence. *Int. J. Comp. Fluid Dyn.*, 1994, (4): 171~218

- 29 Harten A. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *J. Comput. Phys.*, 1983, 49: 357~393
- 30 Harten A, Engquist B, Osher S, et al. Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes III. *J. Comput. Phys.*, 1987, 71: 231~303
- 31 Shu C W. TVB uniformly high-order schemes for conservation laws. *Math. Comp.*, 1987, 49: 105~121
- 32 Liu X D, Osher S. Convex ENO high-order multi-dimensional schemes without field by field decomposition or staggered grids. *J. Comput. Phys.*, 1998, 142: 304~338
- 33 Liu X D, Osher S, Chan T. Weighted essentially non-oscillatory schemes. *J. Comput. Phys.*, 1994, 115: 200~212
- 34 Sweby P K. High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws. *SIAM Jour. On Numerical Analysis*, 1984, 21(5): 995~1011
- 35 Yee H C. Construction of explicit and implicit symmetric TVD schemes and their applications. *J. Comput. Phys.*, 1987, 68: 151~179
- 36 Davis S F. A simplified TVD finite difference scheme via artificial viscosity. *SIAM Jour. On Scientific & Statistical Computing*, 1987, 8: 1~18
- 37 Van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme II Monotonicity and Conservation combined in a second-order scheme. *J. Comput. Phys.*, 1974, 14: 361~370
- 38 Boris J P, Book D L. Flux-Corrected Transport III minimal-error FCT algorithms. *J. Comput. Phys.*, 1976, 20: 397~431
- 39 Harten A. On a class of high resolution Total-Variation-Stable finite difference schemes. *SIAM J. On Numerical Analysis*, 1984, 21: 1~22
- 40 Zalesak S T. Fully multidimensional Flux-Corrected Transport algorithms for fluids. *J. Comput. Phys.*, 1979, 31: 335~362
- 41 Shu C W, Osher S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock capturing schemes II. *J. Comput. Phys.*, 1989, 88: 32~78
- 42 Harten A. The artificial compression method for computation of shocks and contact discontinuities III self-adjusting hybrid schemes. *Math of Computation*, 1978, 32: 363~389
- 43 Harten A, Zwas G. Self-adjusting hybrid schemes for shock computations. *J. Comput. Phys.*, 1972, 9: 568~583
- 44 Van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme IV A new approach to numerical convection. *J. Comput. Phys.*, 1977, 23: 276~299
- 45 Zhang H X, Zhuang F G. NND schemes and their applications to numerical simulation of two- and three-dimensional flows. *Advances in Appl. Mech.*, 1992, 29: 193~256
- 46 张涵信. 无波动无自由参数的耗散差分格式. *空气动力学学报*, 1988, 6: 143~165
- 47 邓小刚, 张涵信. NND 格式的推广及在黏流计算中的应用. *空气动力学学报*, 1994, 12: 121~129
- 48 张来平, 张涵信. NND 格式在非结构网格中的推广. *力学学报*, 1996, 28(2): 135~142
- 49 鄂华谟. UENO-A class of ENO schemes constructed in unified way. 见: 北京计算流体力学讨论会文集. 中国科学院力学研究所, 1994. 171~189
- 50 鄂华谟, 汤华中. 多分量流计算的高分辨率 KFVS 有限体积方法. *计算物理*, 2000, 17(2): 179~186
- 51 Tang H Z, Wu H M. High resolution KFVS finite volume methods and its applications in CFD. *Chinese Jour. of Nume. Math. Appl.*, 1999, 22(3): 375~384
- 52 Lale S. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *J. Comput. Phys.*, 1992, 103: 16~42
- 53 Fu D X, Ma Y W. A high order accurate difference scheme for complex flow fields. *J. Comput. Phys.*, 1997, 134: 1~15
- 54 马延文, 傅德薰. 群速度直接控制四阶迎风紧致差分格式. *中国科学 (A 辑)*, 2001, 31: 554~561
- 55 Cockburn B, Shu C W. Nonlinearly stable compact schemes for shock calculations. *SIAM Jour. Numer. Anal.*, 1994, 31: 607~630
- 56 Ravichandran K S. Higher order KFVS algorithms using compact upwind difference operators. *J. Comput. Phys.*, 1997, 130: 161~173
- 57 Adams N A, Shariff K A. A high-resolution hybrid compact-ENO schemes for shock-turbulence interaction problems. *J. Comput. Phys.*, 1996, 127: 27~51
- 58 Wang Z P, Huang G P. An essentially nonoscillatory high order Pade-type(ENO-Pade)scheme. *J. Comput. Phys.*, 2002, 177: 37~58
- 59 Shen Y Q, Yang G W. Hybrid finite compact-WENO schemes for shock calculation. *Inter. Jour. Numer. Methods in Fluids*, 2007, 53: 531~560
- 60 Cockburn B, Shu C W. Nonlinearly stable compact schemes for shock calculations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 1994, 31: 607~630
- 61 Ravichandran K S. Higher order KFVS algorithms using compact upwind difference operators. *J. Comput. Phys.*, 1997, 130: 161~173
- 62 Shen M Y, Zhang Z B, Niu X L. Three-point fifth-order accuracy generalized compact scheme and its application. *Acta Mechanica Sinica*, 2001, 17(2): 142~150
- 63 Shen Y Q, Yang G W, Gao Z. High-resolution finite compact difference schemes for hyperbolic conservation laws. *J. Comput. Phys.*, 2006, 216: 114~137
- 64 邓小刚. 高阶精度耗散加权紧致非线性格式. *中国科学 (A 辑)*, 2001, 31: 554~561
- 65 邓小刚, 刘昕, 毛枚良, 等. 高精度加权紧致非线性格式的研究进展. *力学进展*, 2007, 37(3): 417~427
- 66 Deng X G, Zhang H X. Developing high-order accurate nonlinear compact schemes. *J. Comput. Phys.*, 2000, 165: 22~44
- 67 Deng X G, Liu X, Mao M L, et al. Investigation on weighted compact fifth-order nonlinear scheme and applications to complex flow. *AIAA 2005-5246*, 2005
- 68 Yang J Y, Huang J C. Rearranged flow computations using nonlinear model Boltzmann equations. *J. Comput. Phys.*, 1995, 120: 323~339
- 69 Xu K. Gas-kinetic schemes for unsteady compressible flow simulations. In: von Karman Institute for Fluid Dynamics, Brussels: Belgium, Lecture Series, 1998. 23~37
- 70 Xu K. Gas-kinetic BGK schemes for Navier-Stokes equations and its connection with artificial dissipation and Godunov method. *J. Comput. Phys.*, 2001, 171: 289~335
- 71 Li Z H, Zhang H X. Study on gas kinetic unified algorithm for flows from rarefied transition to continuum. *J. Comput. Phys.*, 2004, 193: 708~738
- 72 Li Z H, Zhang H X. Gas kinetic algorithm using Boltzmann model equation. *Computers & Fluids*, 2004, 33: 967~991

- 73 Bird G A. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flow. London: Oxford Univ. Press, 1994
- 74 Chang S C. 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
- 75 王景涛. 时空守恒元解元方法的高精度格式及其应用. [博士学位论文]. 北京: 北京大学, 2007
- 76 Wang J P. Finite spectral method based on non-periodic fourier transform. *Computer & Fluids*, 1998, 27: 639~644
- 77 邱全辉, 王建平. 不可压缩机翼绕流的有限谱 (FS) 方法计算. *计算力学学报*, 2005, 22(5): 518~523
- 78 刘洪伟, 王建平. 有限谱 ENO 格式及其应用. *应用力学学报*, 2003, 20(2): 27~31
- 79 Takewaki H, Nishiguchi A, Yabe T. Cubic Interpolated pseudo-particle (CIP) method for solve hyperbolic-type equations. *J. Comput. Phys.*, 1985, 61: 261~268
- 80 Yabe T, Xiao F, Utsumi T. The constrained Interpolation profile method for multiphase analysis. *J. Comput. Phys.*, 2001, 169: 556~593
- 81 Xiao F. Unified formulation for compressible and incompressible flows by using multi-integrated moment method: 1-D inviscid compressible flow. *J. Comput. Phys.*, 2004, 195: 629~654
- 82 Ni M J, Munipalli R, Huang P, et al. A current density conservative scheme for incompressible MHD flows at low magnetic Reynolds number. Part II: on an arbitrary collocated mesh. *J. Comput. Phys.*, 2007, 227: 205~228
- 83 Ni M J. Consistent projection methods for variable density incompressible Navier-Stokes equations with continuous surface forces on a rectangular collocated mesh. *J. Comput. Phys.*, 2009, 228: 6938~6956
- 84 Morris P J, Long L N, Bangalore A, et al. A parallel three-dimensional computational aeroacoustics method using non-linear disturbance equations. *J. Comput. Phys.*, 1997, 133: 56~74
- 85 Batten P, Mauro Casella E R, Chakravarthy S. Towards a generalized non-linear acoustics solver, AIAA 2004-3001, 2004
- 86 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): 542~553
- 87 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, 14(3): 345~357
- 88 陈国谦, 高智, 杨志峰. 对流扩散方程的指数型摄动差分格式. *水动力学研究与进展 (A 辑)*, 1992, 7(2): 150~158
- 89 Chen G Q, Gao Z, Yang Z H. A perturbational h^4 exponential finite difference scheme for convective diffusion equation. *J. Comput. Phys.*, 1993, 104: 129~139
- 90 Chen G Q, Yang Z H. A perturbational fourth-order upwind finite difference scheme for convective diffusion equation. *Jour. Hydrodynamics (Ser.B)*, 1993, 5: 10~19
- 91 Yang Z H, Wang X. Progress in the high-order-accurate finite difference methods for fluid flow and heat transfer. *Progress in Natural Science*, 1999, 9(11): 806~812
- 92 高智. 对流扩散方程的高精度差分方法. 见: 北京计算流体力学讨论会论文集 (第 6 辑). 中国科学院力学研究所, 1994. 1~23
- 93 Gao Z. A higher-order accurate compact upwind difference scheme for convective-diffusion equation (Invited Paper) In: Proc. of Asian Workshop on Computational Fluid Dynamics, Mianyang, China, 1994. 18~24
- 94 高智. 对流扩散方程的摄动有限体积方法. 见: 第十一届全国计算流体力学会议论文集, 洛阳, 2002. 38~45
- 95 高智, 柏威. 对流扩散方程的摄动有限体积方法及讨论. *力学学报*, 2004, 36(1): 88~93
- 96 高智. 摄动算法的改进和对流扩散方程的绝对稳定中心差分格式. 见: 第十四届全国计算流体力学会议论文集, 贵阳, 2009. 176~180
- 97 高智. 对流扩散方程的绝对稳定高阶中心差分格式. *力学学报*, 2010, 5: 811~817
- 98 Gao Z. Numerical perturbation algorithm and two absolute positive higher-order central finite volume schemes for the convective diffusion equation (invited paper). In: 8th Asian Conference on Computational Fluid Dynamics, Hong Kong, Jan, 2010. 10~14
- 99 朱可, 李明军. 对流扩散方程 QUICK 格式的数值摄动高精度重构. 见: 第十四届全国计算流体力学会议论文集, 贵阳, 2009-8. 170~175
- 100 杨满叶, 舒适, 李明军. 对流扩散方程的三阶迎风格式的数值摄动高精度重构. *水动力学研究与进展 (A 辑)*, 2010, 25(3): 307~315
- 101 高智. 摄动有限差分方法研究进展. *力学进展*, 2000, 30(2): 200~215
- 102 张德良, 胡宗民. 一种新型的高精度差分方法 — 摄动有限差分方法. 见: 宁建国编. 计算爆炸力学理论、方法及工程应用. 北京: 北京理工大学出版社, 2002. 61~71
- 103 Gao Z, Hu L M. Perturbational finite difference scheme for the convective diffusion equation. *Jour. Hydrodynamics Ser.B*, 2002, 5(2): 51~57
- 104 Gao Z, Hu L M. A perturbational exact numerical solution scheme for the convective diffusion equation. In: Proc. of 4th Asian Conference on Computational Fluid Dynamics, 2000, Sept, Mianyang, China, 2000. 554~560
- 105 李桂波, 李明军, 高智. 对流扩散方程的变步长摄动有限差分格式. *水动力学研究与进展*, 2005, 20(3): 293~99
- 106 朱力立, 胡利民, 高智. 摄动有限差分 (PFD) 方法的数值计算. *水动力学研究与进展*, 2003, 18(6): 656~660
- 107 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*, 2003, 21(3): 342~350
- 108 申义庆, 高智, 杨国伟. NS 方程激波计算的摄动有限差分方法. *空气动力学学报*, 2006, 24(3): 335~339
- 109 申义庆, 高智, 杨顶辉. 一阶双曲方程的摄动有限差分格式. *计算物理*, 2005, 22(6): 650~656
- 110 高智, 向华, 申义庆. 摄动有限体积方法重构近似高精度的意义. *计算物理*, 2004, 21(2): 131~136
- 111 Gao Z, Shen Y Q, Yang G W. Perturbational finite volume method for the solution of 2-D Navier-Stokes equations on unstructured collocated meshes. *CFD Jour.*, 2004, 13(2): 2004~2008
- 112 Gao Z, Yang G W. Perturbation finite volume (PFV) method. *Acta Mechanica Sinica*, 2004, 20(6): 580~590
- 113 Gao Z, Dai M G. Perturbational finite volume method for the solution of 2-D Navier-Stokes equations on structured and unstructured collocated meshes. *Appl. Math. Mech.*, 2005, 26(2): 242~251
- 114 代民果, 高智. 同位网格摄动有限体积格式求解浮力驱动方腔流. *力学学报*, 2006, 38(6): 733~741
- 115 代民果. 有限体积迎风高格式及基于非结构混合网格的复杂流动数值模拟. [博士学位论文]. 北京: 中国科学院研究生院, 2008

- 116 董贺飞. 摄动有限体积法及其在化工两相流中的应用. [博士论文]. 北京: 中国科学院研究生院, 2009
- 117 董贺飞, 张德良, 赵玉潮, 等. T 形微通道中互不相溶两相流数值模拟. 化工学报, 2008, 59(8): 1950~1957
- 118 董贺飞, 张德良, 杨国伟. 摄动有限体积方法及其在两相流中的应用. 计算物理, 2009, 26(6): 857~864
- 119 Shen Y Q, Gao Z, Yang G W. Perturbational finite volume scheme for the Navier-Stokes equations with application to compute flow with shock-wave. In: Proc. of 24th international Symposium on Shock Wave Beijing July, 2004. 38~42
- 120 张德良, 董贺飞, 梁胜明. 求解 NS 方程组的一种新算法——摄动有限体积算法. 见: 中国机械工程学会第 25 届全国学术研讨会, 彰化, 2008. 1121~1124
- 121 Pantankar S V, Spaling D B. A calculation procedure for heat, mass and momentum transport in 3-D parabolic flows. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1972, 15: 1787~1806
- 122 Issa R L. Solution of the implicitly discretized fluid flow equations by operator-splitting. *J. Comput. Phys.*, 1985, 62(1): 40~65
- 123 Date A W. Numerical prediction of natural convection heat transfer in horizontal annulus. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1986, 29: 1457~1464
- 124 Ghia V, Ghia K N, Shin C T. High resolutions for incompressible flow using Navier-Stokes equations and a multi-grid method. *J. Comput. Phys.*, 1982, 48(3): 387~411
- 125 Schreiber R, Keller H B. Driven cavity flows by efficient numerical techniques. *J. Comput. Phys.*, 1983, 49: 457~469
- 126 Vanka S P. Block-implicit multigrid solution of Navier-Stokes equations in primitive variables. *J. Comput. Phys.*, 1986, 65: 138~158
- 127 Jones P A. comparison problem for numerical methods in fluid dynamics: the double glazing problem. In: Lewis R W, Morgan K, eds, Numerical Methods in Fluids and Thermal Problems, Swansea UK: Pineridge Press, 1979. 338~348
- 128 Mayne D A, Usmani A S, Crapper M. H-adaptive finite element solution of high Rayleigh number thermally driven cavity problem. *Int. J. Numer. Method, Heat Fluid Flow*, 2000, 10(6): 598~615
- 129 Wan D C, Patnaik B S V, Wei G W. A new benchmark quality solution for the buoyancy-driven cavity flow by discrete singular convolution. *Numer. Heat Transfer (Part B)*, 2001, 40: 199~228
- 130 Osher S, Sethian J A. Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *J. Comput. Phys.*, 1988, 79: 12~49
- 131 Osher S, Fedkiw R. Level-Set Method and Dynamic Implicit Surfaces. New York: Springer-Verlog Inc, 2003

NUMERICAL PERTURBATION ALGORITHM AND ITS CFD SCHEMES*

GAO Zhi†

LHD, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

Abstract The numerical perturbation algorithm presented by the author is to couple fluid dynamics effects with mathematical basic schemes (MBS), especially with the most simplest MBS, i.e. the first order upwind and the second order central schemes for the Navier-Stokes(NS) equations and convective diffusion equation. As a result, many new schemes are obtained, i.e. perturbational finite difference scheme (PDS) and perturbational finite volume scheme (PVS). The main steps of constructing PDS and PVS are as follows: the flux and coefficient of convective derivative in MBS are reconstructed as power-series of grid interval; by splitting resultant scheme above and operating the splitted scheme, the high-order fluid mechanics relation is obtained; the variables at upstream and downstream nodes are expanded in Taylor series; by eliminating truncated error terms in the modified differential equation of the reconstructed scheme the undetermined coefficients in the power-series are determined and finally the PDS and PVS are obtained. Formulations of PDS and PVS are product of MBS and numerical perturbation reconstruction functions, that are simple polynomial of $R_{\Delta x}$ (or $\lambda R_{\Delta x}$), where $R_{\Delta x}$ and λ are grid Reynolds number and grid CFL number, respectively.

PDS and PVS and the original MBS utilize the same nodes and are nearly equal in simplicity But PDS and PVS have higher accurate and larger stable-range than MBS. For example, the most simplest and the

* The project supported by the National Natural Science Foundation of China (10872204)

† E-mail: gaozhi@imech.ac.cn

most important six PDS and PVS for the convection diffusion (CD) equation are : sixth-order accurate upwind finite-difference PDS, dual perturbation (DP) fourth-and eighth-order accurate central PDS, dual perturbation third- and fifth-order accurate (interpolation approximation) finite volume (FV) central PVS and sixth order accurate upwind PVS. This six schemes are absolute stable or absolute positive and are non-oscillatory schemes for any values of grid Reynolds number. In one dimensional case, this six schemes are TVD scheme for any values of grid Reynolds number. However, the same order MBS must use multi-nodes and oscillate on coarse grids. PDS and PVS can not only be directly used to calculate flow, but also act as a basic or starting scheme for reconstructing high resolution scheme by self-adjust numerical dissipation. The above six PDS and PVS and others have already been used to calculate incompressible flows, compressible flows, mass transfer and Marangoni convection in the cases of a falling drop, two phase flows and others, and some excellent numerical results are achieved. For example, PVS solve lib-driven and buoyancy-driven cavity flows and result in several new Benchmark solutions. The numerical perturbation algorithm and corresponding schemes are also called Gao's algorithm and Gao's schemes. Several subjects worthy of further study are discussed. The present method is also suitable for reconstructing MBS of other mathematical physics equations (such as the simplified Boltzmann equation, magnetohydrodynamic equations, KdV-Burgers equation etc.) with coupling dynamics effects.

Keywords computational fluid dynamics, numerical perturbation algorithm, mathematical basic scheme, perturbational finite difference scheme, perturbational finite volume scheme



高智, 男, 1937 年 11 月生, 山西省祁县人. 1960 年北京大学数学力学系毕业, 分配到中国科学院力学研究所工作; 曾任研究员, 博士研究生导师; 《力学进展》和《应用数学与计算数学学报》编委; 是南京航空航天大学名誉教授. 主要从事流体力学与计算流体力学研究: 在国际上最早提出简化 Navier-Stokes (NS) 方程 (通常称 PNS 方程) 空间推进方法求解高速绕物体流动, 并与王汝权等合作用于工程任务计算. 提出黏性/无黏干扰剪切流动 (ISF) 理论、提炼出 ISF 流动领域、运动规律、数学表述、壁条件 (判据), 导出 ISF 空间小尺度结构演化规律、揭示了干扰流局部热突增等现象. 和庄逢甘合作提出湍流大小尺度运动方程组, 证实尺度间相互作用的近程特性等. 创立数值摄动算法、是高精度不振荡 CFD 格式的新构建法. 由此构建了对流扩散型方程的三基点高精度不振荡迎风和中心有限差分 and 有限体积格式. 提出气流化学激光性能分析的运动论模型等. 研究成果用途: PNS 空间推进方法得到广泛应用; 已有学者称高氏干扰剪切流动理论、高氏壁判据; 数值摄动算法为新型高精度方法、高算法和高格式.