基于正位网格的局部时空守恒格式☆

申华[1]，刘凯欣[1,*]，张德良[2]
（1.北京大学力学与空天技术系，北京 100871;
2.中国科学院力学研究所，北京 100080）

摘要： 时空守恒元-解元(CE/SE)方法是近十年来发展起来的一种新的数值算法，最早是由NASA Lewis研究中心的Chang[1，2]及其合作者提出的，后来由张增产[3]和王刚等人[4-7]对该方法进行了改进。理论和实际计算都证明该算法有很高的精度，特别擅长于求解守恒型方程。但是目前该算法只有少数几个版本的格式，这是因为为了保证全局时空守恒，现有格式都采用了在时间方向上相互交错的网格，这就大大限制了格式的灵活性。为此，本文对CE/SE方法进行了改进，得到了一种基于正位网格的局部时空守恒格式(LSTC)。该格式在应用中变得更简洁，最重要的是为时空守恒格式的发展提供了新的思路。不仅如此，该格式还继承了CE/SE方法几乎所有的特点和优点：1.将时间和空间统一起来同等对待；2.把流场物理量及其空间导数作为独立未知量同时求解；3.在推广到多维时无需使用算子分裂或方向交替技术，是一种真正意义上的多维算法；4.捕捉激波不需要Riemann求解器，激波分辨率高，在间断处能有效抑制非物理振荡。

关键词：局部时空守恒格式(LSTC)、正位网格、时空守恒元-解元(CE/SE)方法

一、一维局部时空守恒格式

1.1. 格式的构造

为了便于理论分析，首先我们考虑简单的对流方程：

$$\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}=0 \tag{1.1}$$

这里扩散速度 $a\neq0$ 是一个常数，令 $x_1=x, x_2=t$ 表示二维Euclidean空间 E_2 中的两个坐标。令 $\vec{h}=(au,u)$，（1.1）式可以写成散度的形式 $\nabla\cdot\vec{h}=0$。根据Gauss散度定理，方程（1.1）的积分形式可以表示成：

$$\int_{S(V)}\vec{h}\cdot\overrightarrow{ds}=0 \tag{1.2}$$

这里，S（V）是 E_2 中任意时空区域的边界，向量 $\vec{h}=(au,u)$ 是时空流矢量。$\overrightarrow{ds}=d\sigma\vec{n}$，$d\sigma$ 和 $\vec{n}$ 分别为微元线段的长度和 S（V）的外法向量。

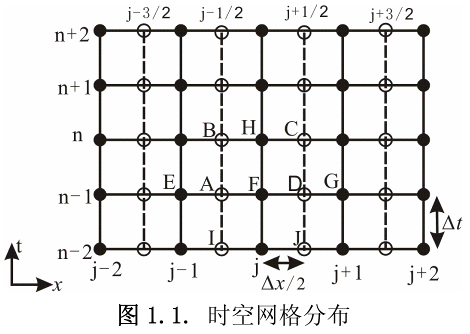


图 1.1. 时空网格分布

☆国家自然科学基金资助项目（批准号 10732010、10972010）。

* 通信作者。电子邮箱：kliu@pku.edu.cn.

如图 1.1 所示，整个二维时空间划分成均匀的非交错网格。●是计算过程中用于存储数据的点，○是两个相邻黑色实心点的中点，是用于辅助计算的插值点。按照 CE/SE 的做法，物理量及其导数同时求解，以达到利用较少的节点得到较高精度的目的。

这里，我们不再严格定义时空守恒元和解元，而是通过在一个守恒单元上求解方程的积分形式得到基本的格式，然后利用插值完成计算。对于图 1.1 中的长方形守恒单元 ABCD，AB，BC，CD，DA 的外法向分别是(-1,0), (0,1), (1,0) 和(0,-1)。因此，式(1.2)等价于：

$$\int_{ABCD} \vec{h}\cdot\vec{ds} = -a\int_{AB} u(x,t)dt + \int_{BC} u(x,t)dx + a\int_{CD} u(x,t)dt - \int_{DA} u(x,t)dx = 0 \qquad (1.3)$$

式（1.3）的具体形式依赖于长方形各边上 $u(x,t)$的近似式，这里我们采用简单的一阶 Taylor 展开进行近似,将 Taylor 展式代入（1.3）并化简得到：

$$u_j^n = \frac{1}{2}[(1+2\nu)u_{j-\frac{1}{2}}^{n-1} + (1-2\nu)u_{j+\frac{1}{2}}^{n-1}] + \frac{\Delta x}{8}(1-4\nu^2)[(u_x)_{j-\frac{1}{2}}^{n-1} - (u_x)_{j+\frac{1}{2}}^{n-1}] \qquad (1.4)$$

其中 $\nu = a\dfrac{\Delta t}{\Delta x}$。

利用守恒单元 ABCD 中的物理量在 B，C 点的连续性可以得到：

$$(u_x)_j^{n+} = \frac{2(u_{j+\frac{1}{2}}^n - u_j^n)}{\Delta x} = \frac{2[u_{j+\frac{1}{2}}^{n-1} + (u_t)_{j+\frac{1}{2}}^{n-1}\Delta t - u_j^n)}{\Delta x} \qquad (1.5)$$

$$(u_x)_j^{n-} = -\frac{2(u_{j-\frac{1}{2}}^n - u_j^n)}{\Delta x} = -\frac{2[u_{j-\frac{1}{2}}^{n-1} + (u_t)_{j-\frac{1}{2}}^{n-1}\Delta t - u_j^n)}{\Delta x} \qquad (1.6)$$

为了抑制非物理振荡，我们引入一个加权平均函数作为限制器对上述两个导数做一个加权平均：

$$(u_x)_j^n = W[(u_x)_j^{n+}, (u_x)_j^{n-}, \alpha]\text{，}W[x_-, x_+, \alpha] = \frac{|x_+|^\alpha x_- + |x_-|^\alpha x_+}{|x_+|^\alpha + |x_-|^\alpha} \qquad (1.7)$$

对于不存在间断的情况，我们取 α=0，这时式（1.7）是一个简单的算术平均。对于存在间断的情况，我们一般取 $\alpha = 1 \sim 2$。

式（1.4）~（1.7）表明，网格点（j，n）的物理量和导数依赖于辅助节点（j-1/2，n-1）和（j+1/2，n-1）上的物理量和导数。按照有限体积算法计算流通量的方法，可以有很多种不同的方法计算得到辅助节点上的物理量及其导数，每种方法得到的最终数值格式都不同，这就使得格式可以灵活多变。这里，我们引入一种容易扩展到多维情况的方法。对于 $u_{j+\frac{1}{2}}^{n-1}$，我们用两种方法来求解积分式 $\int_{FG} u(x,t)dx$ 并化简上得到：

$$u_{j+\frac{1}{2}}^{n-1} = \frac{1}{2}[u_{j+1}^{n-1} - (u_x)_{j+1}^{n-1}\frac{\Delta x}{4} + u_{j-1}^{n-1} + (u_x)_{j-1}^{n-1}\frac{\Delta x}{4}] \qquad (1.8)$$

而对于导数，我们同样可以根据物理量在守恒单元中的连续性得到：

$$(u_x)_{j+\frac{1}{2}}^{n-1\,-} = -\frac{2(u_j^{n-1} - u_{j+\frac{1}{2}}^{n-1})}{\Delta x}\text{，}(u_x)_{j+\frac{1}{2}}^{n-1\,+} = \frac{2(u_{j+1}^{n-1} - u_{j+\frac{1}{2}}^{n-1})}{\Delta x} \qquad (1.9)$$

对两个值作加权平均得到：

$$(u_x)^{n-1}_{j+\frac{1}{2}} = W[(u_x)^{n-1+}_{j+\frac{1}{2}}, (u_x)^{n-1-}_{j+\frac{1}{2}}, \alpha] \tag{1.10}$$

式（1.4）~（1.10）表明，（j，n）点的物理量及其导数可以通过（j-1，n-1），（j，n-1）和（j+1，n-1）上的物理量及其导数显式求得。因而，这是一个显式的三点格式。由于在计算 F 点和 H 点的物理量时对线段 AD 采用了不同的积分形式，因而对于长方形区域 BIJC 来说，在边界 AD 上的流通量不能保证完全抵消，因此在时间方向上该格式不能保证完全的全局守恒。但在局部时空间及全局空间，守恒性仍然是满足的。

1.2. Von Neumann 分析

令 $q^n_j = (u^n_j, (u_x)^n_j \Delta x)$，将格式写成矩阵形式：

$$q^n_j = M_+ q^{n-1}_{j-\frac{1}{2}} + M_- q^{n-1}_{j+\frac{1}{2}} \tag{1.11}$$

$$q^{n-1}_{j+\frac{1}{2}} = M_1 q^{n-1}_j + M_2 q^{n-1}_{j+1} \tag{1.12}$$

其中

$$M_+ = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1+2\nu & \frac{1}{4}-\nu^2 \\ -2 & 2\nu \end{bmatrix}，\quad M_- = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1-2\nu & -\frac{1}{4}+\nu^2 \\ 2 & -2\nu \end{bmatrix}$$

$$M_1 = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{4} \\ -2 & 0 \end{bmatrix}，\quad M_2 = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & -\frac{1}{4} \\ 2 & 0 \end{bmatrix}$$

将式（1.12）代入式（1.11）得：

$$q^n_j = M_+ M_1 q^{n-1}_{j-1} + M_+ M_2 q^{n-1}_j + M_- M_1 q^{n-1}_j + M_- M_2 q^{n-1}_{j+1} \tag{1.13}$$

定义 $q^n_j = q^*(n,\theta) e^{ij\theta}\,(-\pi \le \theta < \pi, e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta)$，然后代入（1.13）式得：

$$q^*(n,\theta) = M q^*(n-1,\theta) \tag{1.14}$$

$$M = \begin{bmatrix} 1-(\nu^2+\frac{1}{4})(1-\cos\theta) - i\nu\sin\theta & -\frac{\nu}{4}(1-\cos\theta) - i\frac{1}{8}\sin\theta \\ 2\nu(1-\cos\theta) + i\sin\theta & \frac{1}{4}(1-\cos\theta) \end{bmatrix}$$

矩阵 M 的特征方程为：

$$\begin{aligned} &\lambda^2 - [1-\nu^2(1-\cos\theta) - i\nu\sin\theta]\lambda + \frac{1}{4}(1-\cos\theta) + \frac{1}{4}(\nu^2 - \frac{1}{4})(1-\cos\theta)^2 \\ &-\frac{1}{8}\sin^2\theta + i\frac{\nu}{4}\sin\theta(1-\cos\theta) = 0 \end{aligned} \tag{1.15}$$

假设 λ_1 和 λ_2 是方程（1.15）的两个根，定义函数 $f(\nu,\theta) = \max(|\lambda_1|, |\lambda_2|)$

($0<\nu<1,-\pi\le\theta\le\pi$)。由于式（1.15）的根是比较复杂的复数，我们用数值方法求解。函数 $f(\nu,\theta)$ 随 ν 和 θ 变化的图像如图 1.2 所示。

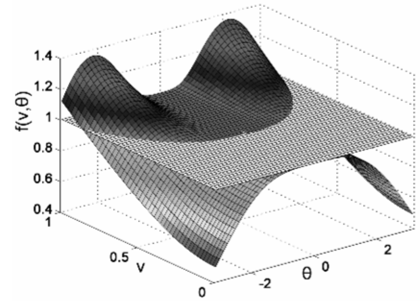


图 1.2. 函数 $f(\nu,\theta)$ 随 ν 和 θ 变化的图像

白色的平面表示 f=1。当 $\nu\le 0.43$，f 总是小于 1。但是在 $\nu=0.5$ 附近，f 的值很接近于 1。并且注意到 Von Neumann 稳定性条件为 $\rho(M)=\max(|\lambda_1|,|\lambda_2|)\le 1+K\Delta t$，在不等式的右边有一小量 $K\Delta t$，因此我们可以适当放宽稳定性条件。数值结果表明，当 $\nu\le 0.52$ 时，f 总是小于 1.01，因而我们可以认为稳定性条件为 $0<\nu\le 0.52$，这与 Taylor 分析和实际计算符合得很好。

1.3. Taylor 分析

将式（1.8）～（1.10）代入式（1.4）得：

$$\begin{aligned}u_j^n=&\frac{1}{4}\{(1+2\nu)[u_j^{n-1}-(u_x)_j^{n-1}\frac{\Delta x}{4}+u_{j-1}^{n-1}+(u_x)_{j-1}^{n-1}\frac{\Delta x}{4}]\\&+(1-2\nu)[u_{j+1}^{n-1}-(u_x)_{j+1}^{n-1}\frac{\Delta x}{4}+u_j^{n-1}+(u_x)_j^{n-1}\frac{\Delta x}{4}]\}+\frac{1-4\nu^2}{8}(2u_j^{n-1}-u_{j-1}^n-u_{j+1}^n)\end{aligned}\tag{1.16}$$

然后将式（1.16）中各项基于点（j，n）进行 Taylor 展开得到对流方程（1.1）的修正方程：

$$\begin{aligned}(\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x})_j^n&=(\frac{a^3\Delta t^2}{6}-\frac{a\Delta x^2}{24})(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_j^n+(\frac{a^4\Delta t^3}{8}-\frac{\Delta x^4}{96\Delta t})(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4})_j^n+O(\Delta t^4,\Delta x^4)\\&=\frac{a\Delta x^2}{24}(4\nu^2-1)(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_j^n+\frac{\Delta x^4}{96\Delta t}(12\nu^4-1)(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4})_j^n+O(\Delta t^4,\Delta x^4)\end{aligned}\tag{1.17}$$

式（1.17）表明，现有格式在时间和空间方向上均是二阶精度，当 $\nu=0.5$ 时，式（1.17）的右边第一项等于 0，第二项也变得很小，这时格式具有三阶精度接近四阶精度。根据 Taylor 分析的稳定性条件 $(-1)^k\nu_{2k}<0$（ ν_{2k} 是 $\frac{\partial^{2k}u}{\partial x^{2k}}$ 的系数)[10], 可以得到 $|\nu|\le\sqrt[4]{\frac{1}{12}}\approx 0.53$，这与 von Neumann 稳定性条件一致。修正方程中奇数阶导数项代表格式的色散，偶数阶导数项代表格式的耗散，当 ν 接近 0.5 时，格式的色散和耗散都较小，计算结果最好，随着 ν 减小格式色散和耗散均增大。因此，现有格式也是和原始 CE/SE 格式一样，是 CFL 条件数敏感的格式，但是根据 Chang 的研究结果，对导数处理稍作修改就能克服这个缺点，具体参看文献[2],对于均匀网格无需这样做。

二、数值算例

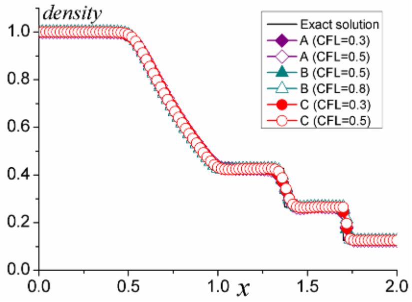
2.1. 一维激波管问题

这是一个经典的一维 Euler 方程算例，首先由 Sod[9]提出。问题描述：在一根长为 2 的

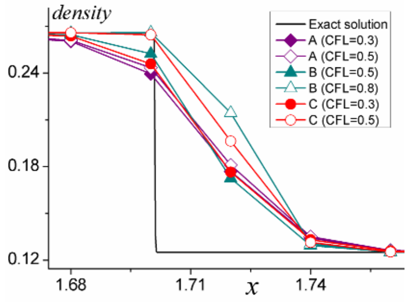
激波管中充满了理想气体，在管的中部有一隔膜将气体分成不同状态的两部分，两边气体状态为：

$$(\rho,u,v,w,p)=\begin{cases}(1.0,0,0,0,1.0),0\le x\le 1\\(0.125,0,0,0,0.1),1<x\le 2\end{cases}\tag{2.1}$$

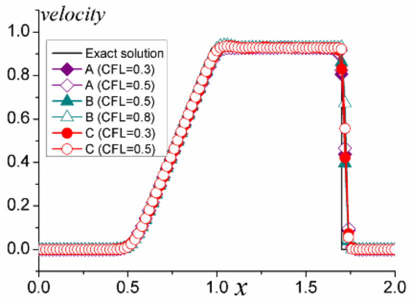
计算开始时，隔膜打开，两边气体开始混合。为了更好说明本文格式的有效性，我们将结果与 3 阶 ENO 格式[8]和原始的 CE/SE 格式[1]得到的结果进行了比较。由于本文格式和 CE/SE 格式均含有自由参数 α，我们计算中均取 α=2。三种格式均采用 100 个网格点进行计算。



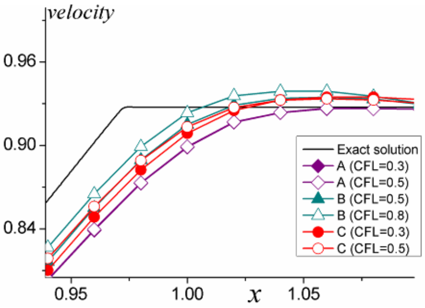
(a) 整个 x 轴



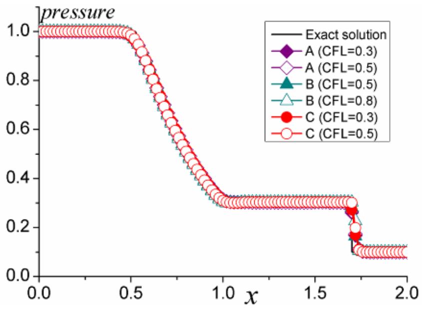
(b) 局部放大图



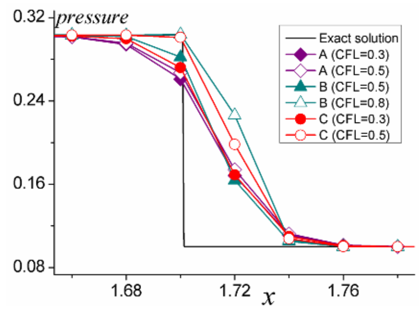
(c) 整个 x 轴



(d) 局部放大图



(e) 整个 x 轴



(f) 局部放大图

图 2.1. t=0.4 时的数值结果。A 代表 3 阶 ENO 格式， B 代表原始 CE/SE 格式，C 代表本文格式。(a)、(b)是密度分布图， (c) 、(d)是速度分布图， (e) 、 (f) 是压强分布图。

从计算结果可以看到，三种格式均具有很高的精度，100 个网格点的计算结果就与精确解很接近，只有在间断处的局部放大图能看出误差来。总体看来，本文格式和原始 CE/SE 格式的计算结果要优于 3 阶 ENO 格式。当 CFL=0.5 时，局部时空守恒格式的计算结果最好，这点与 Taylor 分析吻合。虽然原始的 CE/SE 格式在 CFL 增大时某些地方结果精度会有所提高，但是从速度局部放大图可以看出，当 CFL=0.8 时，原始的 CE/SE 格式的计算结果明显有振荡。从这个算例可以看出局部时空守恒格式有着很高的精度。

结论

本文基于正交网格建立起了一种局部时空守恒格式，格式可以灵活多变，为发展新格式提供了思路。不仅如此，格式还继承了原始 CE/SE 格式的优点，尤其是捕捉激波不需要 Riemann 求解器。该格式很容易推广到多维情况，并且多维格式不需要算子分离方法，是一种真正的多维格式。从算例可以看出，本文格式具有相当高的精度，能够准确捕捉激波位置。该格式是在守恒型 Euler 方程基础上提出来的，不仅适用于流体力学方程，也适用于其它守恒型方程，要推导 N-S 方程的格式只需作很小修改，并且该格式本身具有有限体积格式的特点，容易推广到一般的非结构网格。因此，该格式有着广泛的适用范围。

参 考 文 献

1. S.C. Chang, The Method of Space-Time Conservation Element and Solution Element – A New Approach for Solving the Navier-Stokes and Euler Equations, Journal of Computational Physics, 119, 295~324, 1995.
2. S. C. Chang, Courant Number Insensitive CE/SE Schemes, AIAA Paper 2002-3890, 2002.
3. Z. C. Zhang, S. T. John Yu, A Modified Space-Time Conservation Element and Solution Element Method for Euler and Navier-Stokes Equations, AIAA 99-3277, 1999.
4. G. Wang, D. L. Zhang, K. X. Liu, An Improved CE/SE Scheme and Its Application to Detonation Propagation, Chinese Physics Letters, 24(12), 3563-3566, 2007.
5. J. T. Wang, K. X. Liu, D. L. Zhang, A New CE/SE Scheme for Multi-Material Elastic-Plastic Flow and Its Application, Computers & Fluids, 38, 544-551, 2009.
6. G. Wang, D. L. Zhang, K. X. Liu, J. T. Wang, An Improved CE/SE Scheme for Numerical Simulation of Gaseous and Two-Phase Detonations, Computers & Fluids, 39, 168-177, 2010.
7. K. X. Liu, J. T. WANG, Analysis of High Accuracy Conservation Element and Solution Element Schemes, Chinese Physics Letters, 21(11), 2085-2088, 2004.
8. A. Harten, ENO Schemes with Sub-cell Resolution, Journal of Computational Physics, 83, 148-184, 1980.
9. G. A. Sod, A Survey of Several Finite Difference Methods for Systems of Non-linear Hyperbolic Conservation Laws, Journal of Computational Physics, 27, 1~31, 1978.
10. T. D. Taylor, R. Peyret, Computational Methods for Fluid Flow, Springer-Verlag, 1983.