

对流扩散方程的摄动有限体积(PFV)方法及讨论

高智

(中科院力学所, 北京, 100080)

摘要: 在有限体积(FV)方法的重构近似中, 我们引入数值摄动处理, 即在重构近似中把数值通量摄动展开成网格间距的幂级数, 并利用积分方程自身的性质求出幂级数的系数, 同时获得高精度迎风和中心型摄动有限体积(PFV)格式。文中对标量输运方程给出积分近似为二阶、重构近似为二、三和四阶迎风和中心型 PFV 格式, 这些 PFV 格式的结构形式及使用基点数与一阶迎风格式完全一致, 迎风 PFV 格式满足对流有界准则; 二阶和四阶中心 PFV 格式对网格 Peclet 数的任意值均为正型格式, 比常用的二阶中心格式优越。文中用算例说明 PFV 格式的优良性能, 并把 PFV 方法与性质相近的摄动有限差分(PFD)方法及相关的高精度方法作了对比分析。

关键词: 计算流体力学, 有限体积方法, 数值摄动, 摄动有限体积方法

1. 引言

有限体积(FV)方法是离散积分守恒律的一种数值方法。对于光滑流场解, 从积分守恒律可获得微分守恒律; 当流场中存在间断(如激波)时, 积分守恒律成立, 但导不出等价的微分守恒律, 因此积分守恒律更基础一些。FV 方法又能够方便地利用多种类型的网格(结构及非结构网格), 适于计算区域复杂的情况, 因此在计算流体力学(CFD)和 CFD 软件中得到了普遍的应用。成为与有限差分(FD)方法和有限元(FE)等方法互为补充的有效数值方法。

FV 方法为二级近似法, 对第一级积分近似, 通常采用中点规则、精度为二阶。第二级重构近似, 则采用差分格式, 最简单的是一阶迎风格式和二阶中心格式。对流项的重构近似应满足对流有界准则(convective boundedness criteria), 研究^[1]表明: 诸多线性插值近似, 只有一阶迎风格式满足 CBC。但一阶迎风格式数值耗散太大, 正如专著^[2]评论的, 该格式对三维问题不可取。二阶中心格式在对流效应占优、网格 Peclet 大时发生数值振荡。研究^[1]表明: 对于对流项的重构近似, 要构造既满足 CBC, 精度和分辨率又高的格式, 必须采用非线性插值近似。非线性近似的一个主要方法是把诸线性近似相组合, 例如把一阶迎风、二阶中心、三阶 QUICK 格式等相组合构成满足 CBC 的高精度高分辨率格式, 例如 MINMOD 或 SOUCOUP、MUSCL、CLAM 或 HPLA、SMART 和 EULER 等格式。非线性格式比较复杂, 它们的主要缺点与多基点格式的缺点一致。高阶多基点格式需要求解更复杂的方程、对边界的处理更复杂, 特别是对三维非结构网格, 很难构造多基点高精度格式。因此, 正如专著^[2]评论的, 基于精度、效率、简单和可靠的综合考虑, 二阶中心格式比其他格式好。根据摄动有限差分(PFD)方法^[3-5,8,9]研究的经验, 在 FV 方法的重构近似中把边界通量摄动展开成网格间距的幂级数, 在利用积分方程自身性质求出幂级数系数的同时可获得高精度迎风和中心型摄动有限体积(PFV)格式。本文以标量输运方程为例, 给出构造摄动有限体积(PFV)格式的出发点和数值摄动处理, 给出结构和无结构(三角形)网格迎风和中心型 PFV 格式, 讨论了 PFV 格式的性能、给出数值算例, 并与摄动有限差分(PFD)格式作了简要的对比分析。

2. 标量输运方程的摄动有限体积(PFV)格式

摄动有限体积(PFV)格式的导出以一阶迎风格式为出发点。标量输运方程的积分形式为

$$\frac{\partial|\Omega|\varphi_p}{\partial t} + \int_s \rho\varphi\vec{u} \cdot \vec{n}ds = \int_s k\text{grad}\varphi \cdot \vec{n}ds \quad (2.1)$$

其中 φ 为扩散量, $|\Omega|$ 为控制体(CV)体积, $\varphi_p \equiv \bar{\varphi}$, $\bar{\varphi}$ 和 φ_p 分别是 φ 的 CV 平均值和 CV 中心值. 对二维和三维笛卡儿(Cartesian)网格和二维无结构(三角形)网格(参见图 1), 方程(2.1) 的半离散一阶迎风格式为

$$\frac{\partial|\Omega|\varphi_p}{\partial t} = \sum_{j=1}^M \left[\frac{k}{|\vec{d}_j|^2} \vec{d}_j \cdot \vec{S}_j - \min(\dot{m}_{jf}, 0) \right] \varphi_{jp} - \sum_{j=1}^M \left[\frac{k}{|\vec{d}_j|^2} \vec{d}_j \cdot \vec{S}_j + \max(\dot{m}_{jf}, 0) \right] \varphi_p \quad (2.2)$$

其中 $j=1,2,\dots,M$, $M=3$ 为二维三角形网格, $M=4$ 和 6 为二维和三维的笛卡儿网格. \dot{m}_{jf} 为 CV 的 j 面上的质量通量, 连续性方程给出

$$\sum_j \dot{m}_{jf} = 0 \quad (2.3)$$

足标 p 和 jp 分别表示控制体中心值和相邻控制体中心值, 足标 jf 指 j 界面值, \vec{S}_j 为 j 面的面积矢量, 它的指向与外法线方向一致.

2.1 摄动有限体积 (PFV) 格式: 我们对格式(2.2)中的诸质量通量作数值摄动处理, 即令

$$\dot{m}_{jp} = \dot{m}_j + \sum_{n=1}^3 A_{jn} |\vec{d}_j|^n \quad (2.4)$$

于是得到半离散摄动有限体积(PFV)格式

$$\frac{\partial|\Omega|\varphi_p}{\partial t} = \sum_j \left[\frac{k}{|\vec{d}_j|^2} \vec{d}_j \cdot \vec{S}_j - \min(\dot{m}_{jpp}, 0) \right] \varphi_{jp} - \sum_j \left[\frac{k}{|\vec{d}_j|^2} \vec{d}_j \cdot \vec{S}_j + \max(\dot{m}_{jpp}, 0) \right] \varphi_p \quad (2.5)$$

把摄动展开式(2.4)代入 PFV 格式(2.5), 并利用积分方程的如下诸关系

$$\dot{m}_{jf} \varphi_{jf} = \frac{k}{|\vec{d}_j|^2} \vec{d}_j \cdot \vec{S}_j \varphi'_{jf} \quad (2.6.1)$$

$$\sum \dot{m}_{jf} = 0 \quad (2.6.2)$$

经运算得到如下半离散迎风高精度 PFV 格式

$$\begin{aligned} \frac{\partial |\Omega| \varphi_p}{\partial t} &= \sum_{j=1}^M \left[\frac{k}{|\overline{d}_j|^2} \overline{d}_j \cdot \overline{S}_j - \frac{1-\alpha_j}{2} \dot{m}_{jf} \left(1 + \frac{1}{2} \alpha_j R_{jf} + \frac{1}{3!} R_{jf}^2 + \frac{1}{4!} \alpha_j R_{jf}^3 \right) \right] \varphi_{jp} \\ &- \sum_{j=1}^M \left[\frac{k}{|\overline{d}_j|^2} \overline{d}_j \cdot \overline{S}_j - \frac{1-\alpha_j}{2} \dot{m}_{jf} \left(1 + \frac{1}{2} \alpha_j R_{jf} + \frac{1}{3!} R_{jf}^2 + \frac{1}{4!} \alpha_j R_{jf}^3 \right) \right] \varphi_p \end{aligned} \quad (2.7)$$

其中 $\alpha_j = \text{sign} \dot{m}_{jf}$, $R_{jf} = \dot{m}_{jf} \cdot \overline{d}_j / k \overline{S}_j$, 半离散中心型 PFV 格式为

$$\frac{\partial}{\partial t} (|\Omega| \varphi_p) = \sum_{j=1}^M \left[\frac{k}{|\overline{d}_j|^2} \overline{d}_j \cdot \overline{S}_j - \frac{1}{2} \dot{m}_{jf} \left(1 - \frac{1}{2} R_{jf} + \frac{1}{3!} R_{jf}^2 - \frac{1}{4!} R_{jf}^3 \right) \right] (\varphi_{jp} - \varphi_p) \quad (2.8)$$

其中 $j=1,2,\dots,M$ 。M 的定义与格式(2.2)中的定义一致。

2.2 摄动有限体积 (PFV) 格式的性质: 二维和三维 PFV 格式(2.7)是积分近似为二阶、重构近似为四阶的一种格式; 诸 R_{jx} 取到零次方时该格式简化为一阶迎风格式, 诸 R_{jx} 取到一次和二次方时分别得到重构近似为二阶和三阶的迎风 PFV 格式; 这些迎风摄动格式的结构形式、使用基点数与一阶迎风格式的形式和基点数无疑都一样, 这三种 PFV 格式与一阶迎风 FV 格式一样, 均满足无条件对流有界性准则(convection boundedness criteria, CBC^[1,2]), 就是说, 这四种格式均不会给出振荡解。

在中心型 PFV 格式 (2.8)中, 诸 R_{jf} 取到零次方时为经典二阶中心格式, 该格式在所有 $R_{jf} < 2$ 时为正型格式, 但只要有一个 R_{jf} 大于 2, 二阶中心即为“非正型”格式, 诸 R_{jf} 取到一次方时得到二阶中心型 PFV 格式, 值得强调对诸 R_{jf} 的任意值, 容易证明相应的诸 $(k|\overline{d}_j|^{-2} \overline{d}_j \cdot \overline{S}_j - \frac{1}{2} \dot{m}_{jf} + \frac{1}{4} \dot{m}_{jf} R_{jf})$ 恒大于零, 因此二阶中心型 PFV 格式恒为正型有限体积格式; 诸 R_{jf} 取到二次, 当所有 R_{jf} 都约小于 2 时, 相应的诸 $(k|\overline{d}_j|^{-2} \overline{d}_j \cdot \overline{S}_j - \frac{1}{2} \dot{m}_{jf} + \frac{1}{4} \dot{m}_{jf} R_{jf} - \frac{1}{6} \dot{m}_{jf} R_{jf}^2)$ 恒大于零, 因此重构近似为三阶的中心 PFV 格式当所有 $R_{jf} \leq 2$ 时为正型格式, 但只要有一个 R_{jf} 大于 2, 三阶中心 PFV 格式变成非正型格式。诸 R_{jf} 取到三次方时, 容易证明对诸 R_{jf} 的所有可能值、相应的诸 $[k|\overline{d}_j|^{-2} \overline{d}_j \cdot \overline{S}_j - \frac{1}{2} \dot{m}_{jf} (1 - \frac{1}{2} R_{jf} + \frac{1}{6} R_{jf}^2 - \frac{1}{24} R_{jf}^3)]$ 恒大于零, 故重构近似为四阶精度的中心型 PFV 格式恒为正型有限体积格式。

正型有限体积格式被看作是一维 TVD 格式在二维和三维(结构及非结构网格)情况下的推广^[6,7], 因此二阶和四阶中心型 PFV 格式的实际应用效果肯定比二阶中心格式好。摄动有限差分(PFD)格式计算不可压方腔流动的数值实验^[8,9]表明: 二阶中心型 PFD 格式失效的最

大网格 Peclet 数比二阶中心格式失效的最大网格 Peclet 数约大一个数量级。由此可以推断二阶中心型 PFV 格式与二阶中心 FV 格式失效的最大网格 Peclet 数存在同样的数量关系，文中的算例初步证实了这一推断。

3. 数值算例

文中利用迎风和中心型 PFV 格式以及一阶迎风和二阶中心格式计算了二维驻点流场的标量输运问题。驻点流动的流线和边界条件见示意图 2。标量输运方程的积分形式为(2.1):

二维驻点流速度场为 $u = x, v = -y$ 。边界条件是: 沿北边界(入口边界) $\varphi = 0$, 沿西边界 φ

从零(在 $y=1$)线性增加到 1(在 $y=0$); 南边界为对称条件 $\frac{\partial \varphi}{\partial y} = 0$; 东边界(出口边界)流向梯度

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0。$$

图 3 和图 4 是二阶中心 PFV 格式在 20×20 CV 均匀网格下算出的扩散量(φ)等值线,

图 3 和 4 中的 k 分别为 0.01 和 0.001, $\rho = 1$ 。这些等值线与二阶中心格式在 60×60 CV 均匀网格下算出的结果大致相重合。图 5 说明四种格式(二阶迎风和中心 PFV 格式, 一阶迎风和二阶中心格式)的精度。图 5 的横坐标和纵坐标分别表示控制体数目和通过西边壁的扩散总通量。网格从 10×10 加密到 320×320 CV。在 10×10 均匀粗网格(注: 网格 Peclet 数 $P_{\Delta} = \rho u \Delta x / k$ 在 10 到 100 的范围内变化)下, 对流占优且由于西边壁邻域扩散量 φ 的剧烈变化、导致二阶中心格式解剧烈振荡而不能收敛。然而, 二阶中心 PFV 格式在 10×10 均匀粗网格下可得到有意义的收敛解。随网格加密, 二阶中心格式和 PFV 格式均单调趋向准确总通量值 Q_e [2]。此外, PFV 格式耗费的 CPU 时间是二阶中心格式的一半。

一阶迎风格式和二阶迎风 PFV 格式解均不会出现数值振荡, 然而随网格的加密它们并不是单调趋向准确值 Q_e , 参见图 5, 在最粗的两个网格(10×10 和 20×20)、它们的总通量小于准确值 Q_e , 在 40×40 的网格下, 它们的总通量大于 Q_e 且随网格的进一步加密单调趋向准确值。二阶迎风 PFV 格式耗费的 CPU 时间约是一阶迎风格式耗费的 1/3。由图 5 可知, 二阶迎风和中心 PFV 格式的精度明显高于一阶迎风和二阶中心格式的精度。四阶迎风和中心 PFV 格式与二阶迎风和中心格式相比, 性能亦有进一步的提高, 这个问题将在下节做进一步的讨论。

4. 摄动有限体积 (PFV) 方法与摄动有限差分 (PFD) 方法及其他方法的比较

摄动有限体积(PFV)格式与一阶迎风和二阶中心格式紧密相关、与摄动有限差分(PFD)格式有许多相似之处。因此, 把 PFV 方法和 PFD 方法及其它高精度方法加以比较分析, 将

有助于算法的构成和改进,有助于物理近似、数学近似和离散近似的更好结合。

4.1 PFV 方法的物理讨论:对物理问题进行理论分析和计算时,数学和算法的提法应与物理问题相一致。对流扩散积分守恒律有限体积(FV)方法的重构近似中,涉及控制体(CV)诸界面中心值 φ_f 和它的一阶导数值,参见图6和方程(2.6)。按照流动物理特性和导数的原始

定义,诸 φ_f 和它的一阶导数值可由CV中心值 φ_p 和相邻CV的中心值 φ_p 直接确定,例如对二维笛卡儿网格可由E,W,N和S点值确定。因此,一阶迎风和二阶中心格式的数学和

算法的提法与物理问题完全一致,同样,迎风和中心型PFV格式的数学和算法提法也与物理问题完全一致。在对流扩散微分守恒律的有限差分近似中,涉及中心基点值 φ_{ij} (参见图

7)及它的一阶和二阶导数值,按照流动物理特性和导数的原始定义, φ_{ij} 的一、二阶导数值

可由相邻基点值 $\varphi_{i+1,j}$ $\varphi_{i-1,j}$, $\varphi_{i,j+1}$ 和 $\varphi_{i,j-1}$ (二维情况)直接确定,因此一阶迎风和二阶中心差分格式、高阶迎风和中心PFD格式的数学和算法提法也均与物理问题相一致。

相比之下,多基点方法的数学和算法提法与物理问题不完全一致^[1]。紧致方法^[8]的数学和算法提法与物理问题“基本”不一致,因此需要研究它到底代表什么物理问题,作为数值近似又需要研究它在什么条件下才能收敛到物理问题的解。

PFV格式与一阶迎风和二阶中心格式均具有相同的简洁结构形式,使用和一阶迎风格式相同的基点数和相同的导数阶,与多基点格式和紧致格式相比,这些是它们最突出的优点。

4.2 重构近似中的高精度问题:在有限体积(FV)方法中,若积分近似精度为 n_1 阶,重构

近似为 n_2 阶,则FV方法的精度为 $\min(n_1, n_2)$ 阶。本文积分近似取中点规则为二阶精度,

因此高于二阶的重构近似缺乏理论意义。不过,一维标量输运(逆风扩散)问题的FV和PFV格式计算表明(参见图8),重构近似的高精度仍有实际的好处。但应指出,重构近似高精度对数值解的改善比不上同阶精度差分格式对解的改善,由图8和图9的比较可以清楚地看出这点。图8和图9分别是用中心型PFV和中心型摄动有限差分(PFD)格式计算一维标量输运问题(Peclet数为50,网格数为10)的数值结果。

5. 结束语

在有限体积(FV)方法中,一阶迎风格式因它的结构简洁、使用基点少、无条件满足对流有界准则(CBC)等优点迄今得到不少CFD软件的使用,但它的数值耗散太大、精度太低,不少学者(如^[1])建议不再用它。迎风摄动有限体积(PFV)格式保留了一阶迎风格式的优点,但PFV为高精度格式,明显减轻了数值耗散,因此具有应用价值。

在FV方法中,二阶中心格式与一阶迎风格式同样简单,而且根据精度、效率、简单、可靠等因素的综合考虑,在众多FV格式中二阶中心格式是“最佳选择”^[2],但二阶中心格式有效的网格Peclet数不高,容易发生数值振荡。二阶和四阶中心型PFV格式保留了二阶中心格式的优点,特别是它们对网格Peclet数的任意值均为“正型”有限体积格式,大大扩充了网格Peclet数的适用范围,因此建议用二阶和四阶中心型PFV格式更新二阶中心格式。

本研究为国家自然科学基金资助项目(合同号10032050)

参考文献

- [1]. M.S.Darwish "A new high-resolution scheme based on the normalized variable formulation" *Num.Heat Transfer Part B* 1993 Vol.24,pp,353-371
- [2]. J.H.Ferziger, M.Peric "Computational Methods for Fluid Dynamics" Springer, 1996
- [3]. Z.Gao "A higher-order accurate upwind compact difference scheme for convective diffusion equation" In: Proc. Of Asian Workshop on Computational Fluid Dynamics. Sept. 1994 Sichuan, China (p.18-23)
- [4]. 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,p.1-23
- [5]. 高智 "摄动有限差分方法研究的若干进展" 力学进展 2000,30(2): 200-215
- [6]. 李荫藩, 宋松和, 周铁 "双曲型守恒律的高阶、高分辨有限体积法" 力学进展 2001 31(2):245-263
- [7]. S.Spekrijse "Multigrid solution of monotone second-order discretization of hyperbolic conservation laws" *Math. Comp.* 1987 49:135-155
- [8]. 高智 "摄动有限差分方法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 14 辑) 2002,p.1-26
- [9]. 朱力立, 张德良, 高智 "不可压方腔流动的有限差分格式解" 水动力学研究与进展(待发表)
- [10]. Shen Mengyu, etal "Some advances in study of high order accuracy and high resolution finite difference scheme" In " New Advances in Computational Fluid Dynamics" (Eas.F.Dubois, Wu Hua mo) Higher Education Press, 2001 (p.70-111)

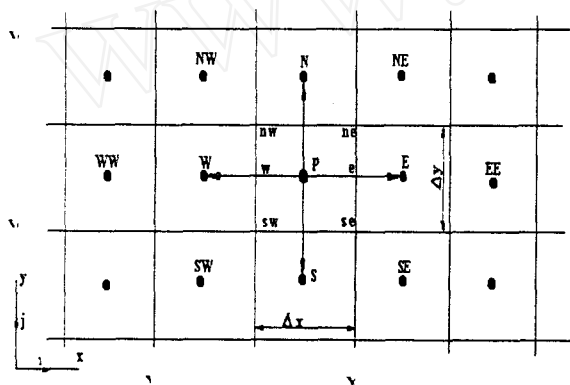


图 1 a 有限体积方法中心型控制体和二维笛卡尔网格。

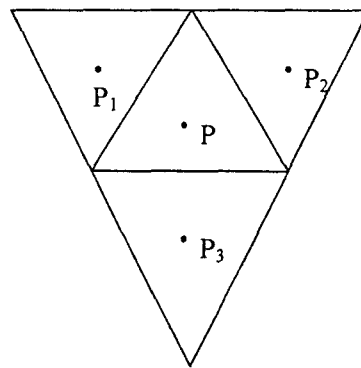


图 1 b 三角形网格。

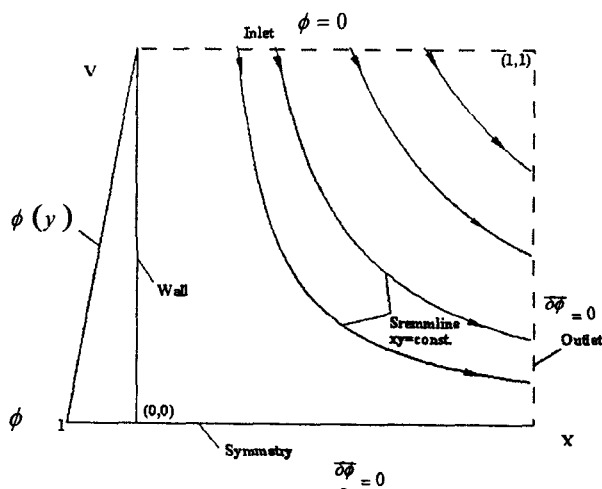


图 2. 二维驻点流流线和输运标量的边界条件。

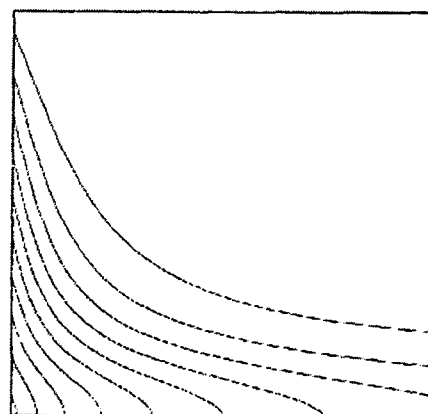


图 3 扩散量 ϕ 等值线 (从 0.05~0.95, 间隔为 0.1, $k=0.01$) .

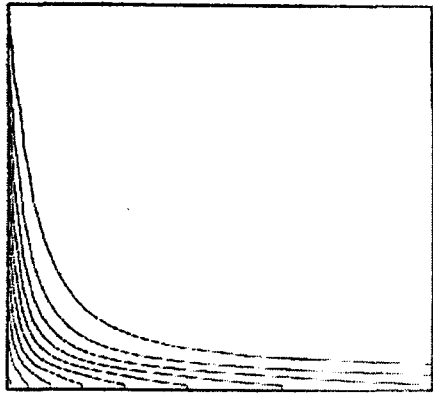


图4 扩散量 ϕ 等值线 (从 0.05~0.95, 间隔为 0.1, $k=0.001$) .

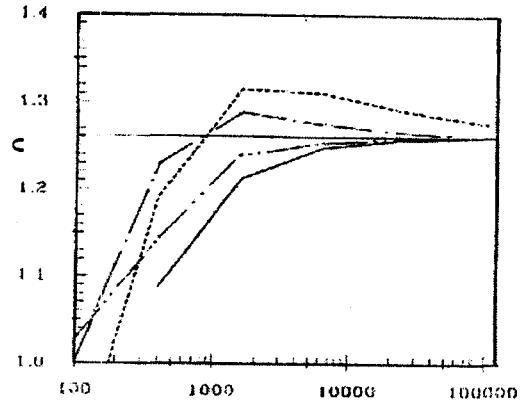


图5 西壁 ($x=0$) 扩散总通量 Q 随网格数的变化 ($k=0.001$,
 一阶迎风格式, -·-·- 二阶迎风 PFV 格式, — 准确值, -·-·- 二阶中心 PFV 格式, --- 二阶中心格式)。

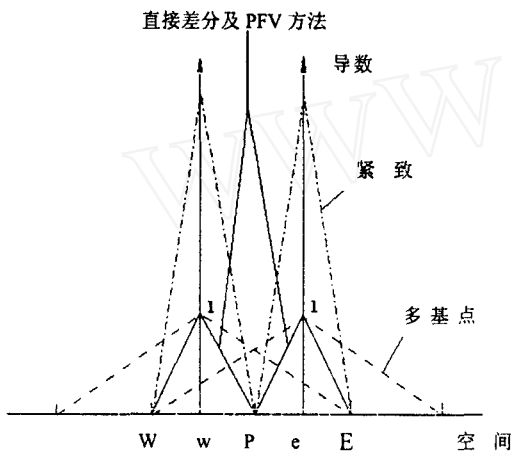


图6 对流扩散方程有限体积(FV)方法重构近似诸方法示意图(直接方法指一阶迎风和二阶中心格式)。

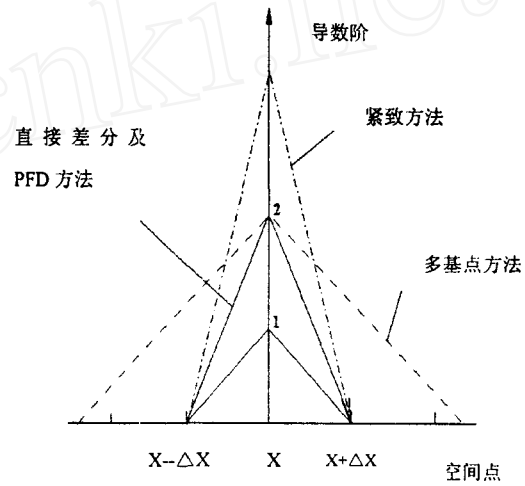


图7 对流扩散方程有限差分近似诸方法示意图(直接方法指一阶迎风和二阶中心格式)。

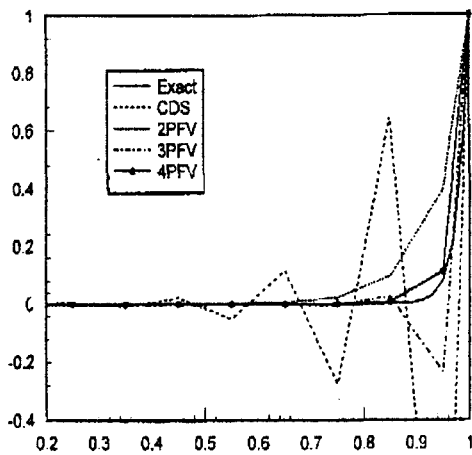


图8 一维标量输运的中心型 PFV 格式解

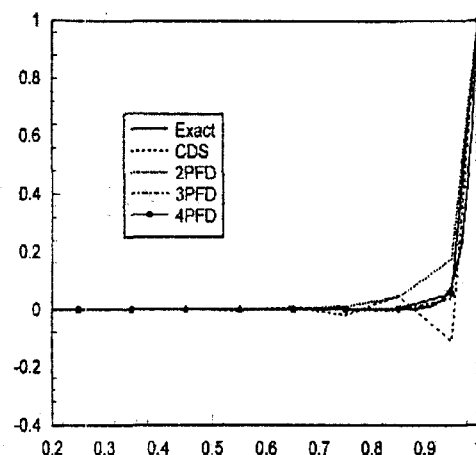


图9 一维标量输运的中心型 PFD 格式解