

对流扩散方程的变步长摄动有限差分格式

高智, 李明军, 朱力立

(中国科学院力学所 LHD 实验室, 北京, 100080)

摘要 摄动有限差分(PFD)方法是构造高精度差分格式的一种新方法。变步长摄动有限差分方法是等步长摄动有限差分方法的推广。对需要局部加密网格的计算问题,变步长加密不需要对自变量进行数学变换,且和等步长 PFD 格式一样,具有如下的共同特点:从变步长一阶迎风格式出发,通过把对流系数作变步长摄动展开,展开幂级数系数通过消去摄动格式修正微分方程的截断误差项求出,由此获得高精度变步长 PFD 格式。该格式在一、二和三维情况下分别仅使用三、五和七个基点,且具有迎风性。文中利用变步长 PFD 格式数值模拟了对流扩散反应模型方程, Burgers 方程及气袋问题,并与一阶迎风和二阶中心格式及问题的精确解析解作了比较。数值试验表明,与一阶迎风和二阶中心格式相比,变步长 PFD 格式具有精度高,稳定性与收敛性好的特点。变步长 PFD 格式与等步长 PFD 格式相比,对高粘性薄边界层结构的分辨率得到了明显的提高。

关键字 高精度差分格式; 摄动有限差分方法; 变步长摄动有限差分方法

1 引言

对微分方程的差分求解,上世纪 90 年代,高智提出数值摄动思想和摄动有限差分(PFD)方法^[1,2]。摄动有限差分(PFD)方法与增加基点数目的方法和引入高阶导数的紧致方法不同,它是微分方程差分近似高精度化的一条新思路。利用 PFD 方法给出对流扩散方程,对流扩散反应模型方程、二阶双曲型方程、Kdv 方程等在离散单元内局部线性化方程的摄动精确数值解(PENS)格式,该格式具有一阶迎风格式的简洁结构形式,在一、二和三维情况下分别使用 3、5 和 7 个基点。数值实验表明:对解的间断、物理振荡等复杂现象 PENS 格式精度高、分辨率高^[3,4]。

然而,在物理量变化梯度大的局部区域,需要局部加密网格,局部加密网格的通常处理办法是,对自变量进行数学变换。然而,对自变量进行数学变换容易引起误差积累和非物理数值振荡。本文利用等步长 PFD 方法的基本思想,构造变步长 PFD 格式。变步长 PFD 格式形式上比等步长 PFD 格式复杂,但在处理局部加密网格的计算问题中,变步长 PFD 格式不需要对自变量进行数学变换,可以较好地解决数值计算中的误差积累和非物理数值振荡问题。数值试验表明,与一阶迎风格式和二阶中心差分格式比较,变步长 PFD 格式具有精度高,稳定性与收敛性好的特点。

2 对流扩散反应方程的变步长 PFD 格式

一维对流扩散方程为

$$A \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + S \quad (2.1)$$

首先在求解域内, 以差分网格或差分节点代替连续区域, u 在第 $(i-1)$, i 以及 $(i+1)$ 节点处的取值为 u_{i-1} , u_i 及 u_{i+1} , 且 $\frac{\partial^n u}{\partial x^n}$ ($n=1$ 和 2) 在第 $(i-1)$, i 及第 $(i+1)$ 节点处取值分别表示为 $u_{i-1}^{(n)}$, $u_i^{(n)}$ 及 $u_{i+1}^{(n)}$. 第 $(i-1)$ 和 i 节点间的网格步长记为 Δx_- , i 和 $(i+1)$ 节点间的网格步长为 Δx_+ .

对流扩散方程 (2.1) 的变步长一阶迎风差分格式为:

$$\frac{1-\alpha}{2} \frac{A_i}{\Delta x_+} (u_{i+1} - u_i) + \frac{1+\alpha}{2} \frac{A_i}{\Delta x_-} (u_i - u_{i-1}) = \frac{(u_{i-1} - u_i)\Delta x_- + (u_{i+1} - u_i)\Delta x_+}{[\frac{1}{2} + \frac{1}{6} A_i (\Delta x_+ - \Delta x_-)](\Delta x_-^2 \Delta x_+ + \Delta x_+^2 \Delta x_-)} + S_i \quad (2.2)$$

其中 Δx_- , Δx_+ 为网格步长。

差分格式 (2.2) 的修正微分方程为

$$A \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + S + E_{x_-} \Delta x_- + E_{x_+} \Delta x_+ + o(\Delta x_+, \Delta x_-) \quad (2.3)$$

其中

$$E_{x_-} = \frac{1+\alpha}{4} A_i u_i'' \Delta x_- \quad E_{x_+} = -\frac{1-\alpha}{4} A_i u_i'' \Delta x_+$$

设想对格式(2.2)中的系数 A_i 作变步长数值摄动处理, 得到变步长摄动差分格式为:

$$\frac{1-\alpha}{2} \frac{A_p}{\Delta x_+} (u_{i+1} - u_i) + \frac{1+\alpha}{2} \frac{A_p}{\Delta x_-} (u_i - u_{i-1}) = \frac{(u_{i-1} - u_i)\Delta x_- + (u_{i+1} - u_i)\Delta x_+}{[\frac{1}{2} + \frac{1}{6} A_i (\Delta x_+ - \Delta x_-)](\Delta x_-^2 \Delta x_+ + \Delta x_+^2 \Delta x_-)} + S_p \quad (2.4)$$

其中

$$\begin{aligned} A_p &= A + \frac{1-\alpha}{2} A_+ \Delta x_+ + \frac{1+\alpha}{2} A_- \Delta x_-, \\ S_p &= S + \frac{1-\alpha}{2} S_+ \Delta x_+ + \frac{1+\alpha}{2} S_- \Delta x_-. \end{aligned} \quad (2.5)$$

摄动差分格式(2.4)的修正微分方程为

$$2A_p \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + S_p + E_{p,x} \Delta x_+ + E_{p,x} \Delta x_- + o(\Delta x_+^2, \Delta x_+ \Delta x_-, \Delta x_-^2) \quad (2.6)$$

那么若如下关系成立

$$\begin{aligned} A_+ \frac{\partial u}{\partial x} &= -\frac{1-\alpha}{2} A \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \Delta S_+ + o(\Delta x_+), \\ A_- \frac{\partial u}{\partial x} &= \frac{1+\alpha}{2} A \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \Delta S_- + o(\Delta x_-). \end{aligned} \quad (2.7)$$

则摄动格式(2.4)的精度达到二阶, 利用方程(2.1)和(2.2)求得

$$A_+ = -\frac{1-\alpha}{4} A^2 + o(h)$$

$$\begin{aligned}
S_+ &= -\frac{1-\alpha}{4}AS + o(h) \\
A_- &= \frac{1+\alpha}{4}A^2 + o(h) \\
S_- &= \frac{1+\alpha}{4}AS + o(h)
\end{aligned} \tag{2.8}$$

再利用式(2.6)和(2.7)可得

$$\begin{aligned}
A_p &= A - \frac{1-\alpha}{4}A^2\Delta x_+ + \frac{1+\alpha}{4}A^2\Delta x_- = A\left(1 + \frac{1-\alpha}{4}A\Delta x_+ + \frac{1+\alpha}{4}A\Delta x_-\right) \\
S_p &= S - S\frac{1-\alpha}{2}A\Delta x_+ + S\frac{1+\alpha}{2}A\Delta x_- = S\left(1 + \frac{1-\alpha}{4}A\Delta x_+ + \frac{1+\alpha}{4}A\Delta x_-\right)
\end{aligned} \tag{2.9}$$

从而得到一维对流扩散方程(2.1)的二阶变网格步长摄动有限差分格式为

$$\begin{aligned}
&\frac{1-\alpha}{2}\frac{1}{\Delta x_+}A_i(u_{i+1}-u_i) + \frac{1+\alpha}{2}\frac{1}{\Delta x_-}A_i(u_i-u_{i-1}) \\
&= \frac{1}{1 - \frac{1-\alpha}{4}A_i\Delta x_+ + \frac{1+\alpha}{4}A_i\Delta x_-} \cdot \frac{(u_{i-1}-u_i)\Delta x_+ + (u_{i+1}-u_i)\Delta x_-}{\left[\frac{1}{2} + \frac{1}{6}A_i(\Delta x_+ - \Delta x_-)\right](\Delta x_-^2\Delta x_+ + \Delta x_+^2\Delta x_-)} + S_i
\end{aligned} \tag{2.10}$$

3 数值实验

(1) 对常系数对流扩散反应模型方程

$$\begin{cases}
\varepsilon z'' + z' - (1 + \varepsilon)z = 0, \\
z_{-1} = 1 + \exp(-2) \\
z_1 = 1 + \exp\left(-\frac{2(1 + \varepsilon)}{\varepsilon}\right)
\end{cases} \quad (-1 < x < 1) \tag{3.1}$$

其精确解为 $z_{ex}(x) = \exp(x-1) + \exp\left[-\frac{(1+\varepsilon)}{\varepsilon}(1+x)\right]$ 。计算显示, 参见图 1 和 2,

当反应变化梯度的参数 ε 较大 ($\varepsilon > 0.1$) 时, 格式优劣不明显; 但当 ε 较小 ($\varepsilon \leq 0.1$) 时, 变步长摄动有限差分格式明显优于一阶迎风格式。

(2) 气袋问题为如下方程描述^[3]

$$\begin{cases}
\varepsilon z'' - [(1-2x)z]' = 0, \\
z(0) = z(1) = 1,
\end{cases} \quad (0 < x < 1) \tag{3.2}$$

其精确解为 $z_{ex}(x) = \exp\left[\frac{x}{\varepsilon}(1-x)\right]$ 。计算显示, 参见图 3 和图 4, 当参数 ε 较大

($\varepsilon > 0.1$) 时, 几种差分格式差别不大; 当参数 ε 较小时 ($\varepsilon \leq 0.1$) 时, 可以看到一阶迎风格式存在一定误差, 而迎风型和中心型变网格步长 PFD 格式与精确解符合均比较好。

(3) Burgers 方程

Burgers 方程是典型的模型方程，其形式为：

$$\begin{cases} zz' = z'' / \text{Re} & -1 < x < 1 \\ z_{-1} = th(\text{Re}/2) \\ z_1 = -th(\text{Re}/2) \end{cases} \quad (3.3)$$

精确解为 $z_{ex}(x) = -th(x\text{Re}/2)$ 。在利用非等距网络的差分格式计算中，我们将 $x=0$ 附近的网格细分 100 倍，其余维持不变。对该网格系统分别采用变步长网格迎风 and 中心型 PFD 格式、变步长一阶迎风和中心格式以及等步长一阶迎风和二阶中心格式进行了计算，并得到了 $\text{Re}=10,100,200,500,1000,1400$ 六种雷诺数下的计算结果图。参见图 5-10

从图 5-10 可以看到：在低 Re 数下，如 $\text{Re}=10$ 的情况下，一阶迎风格式已表现出明显的数值扩散（伪扩散）。通过对 $x = 0^+$ 处的局部放大我们看到迎风 PFD 格式、中心 PFD 格式和标准精确解已很接近，但中心 PFD 格式更精确，与精确解基本重合。在 $\text{Re}=100$ 时，二阶中心格式在 $x = 0$ 附近出现误差，比精确解变化更为陡峭，有发生振荡的趋势，一阶迎风格式的伪扩散表现得更为明显。相对而言，变步长迎风 PFD 格式误差大大减小，同时变步长中心 PFD 格式与精确解符合得很好。

在 $\text{Re}=200$ 时，二阶中心格式在 $x = 0$ 附近出现了严重振荡，而中心 PFD 格式仍与精确解吻合且不发生振荡。至 $\text{Re}=500$ 时二阶中心格式已不能得到有效的结果。而中心型 PFD 格式依然与精确解吻合得很好。但当 $\text{Re}=1000$ 时，中心型 PFD 格式也出现了类似于 $\text{Re}=100$ 时二阶中心格式出现得情况，而迎风型 PFD 格式虽有微小的伪扩散，但精度还是远远高于一阶迎风，与精确解吻合得好。至 $\text{Re}=1400$ 时，中心型 PFD 格式发生振荡。

从以上结果可以看出，无论是迎风型 PFD 还是中心型 PFD，从精度和稳定性各方面均大大优于一阶迎风和二阶中心格式。相对而言，在低 Re 数 ($\text{Re} < 10^3$) 范围内使用中心型 PFD 格式较优而 Re 数较高 ($\text{Re} \geq 1000$) 时，采用迎风型 PFD 格式效果更好。

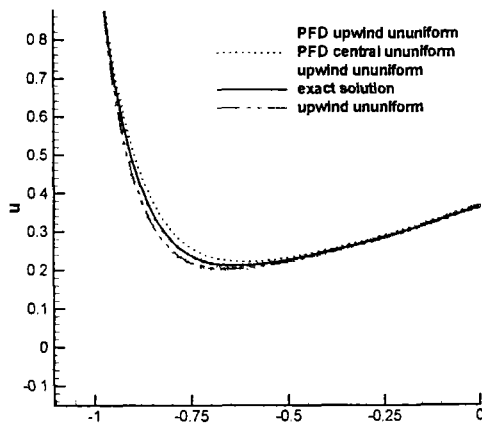


图 1. 常系数对流扩散反应模型方程数值结果比较. $\varepsilon = 0.02$

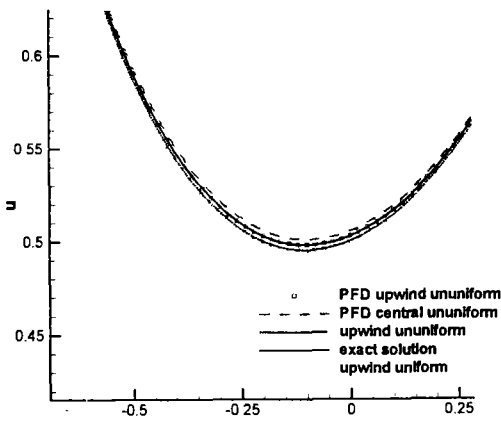


图 2. 常系数对流扩散反应模型方程数值结果比较. $\varepsilon = 1$

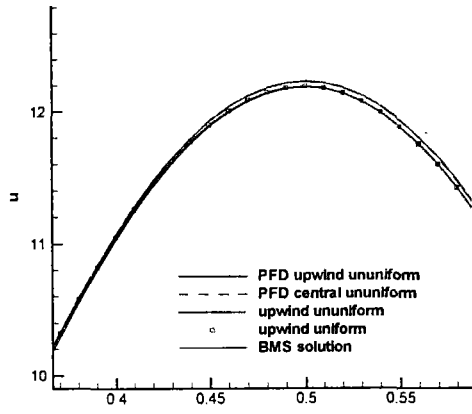


图 3.气袋问题数值结果比较.
 $\varepsilon = 0.04$

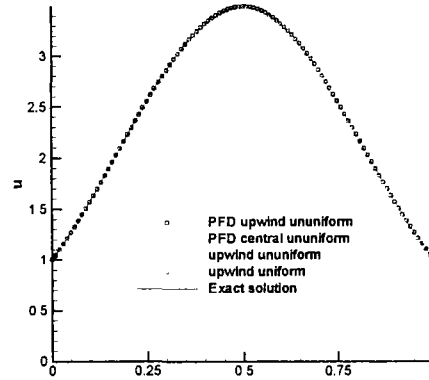


图 4.气袋问题数值结果比较.
 $\varepsilon = 0.1$

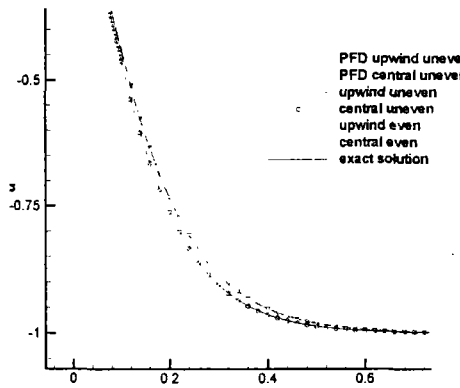


图 5.Burgers 方程几种格式数值结果比较.Re=10

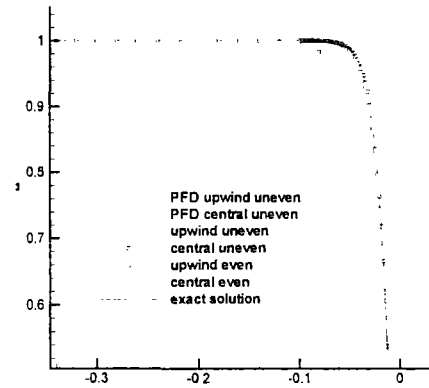


图 6.Burgers 方程 Re=100 数值结果局部放大.

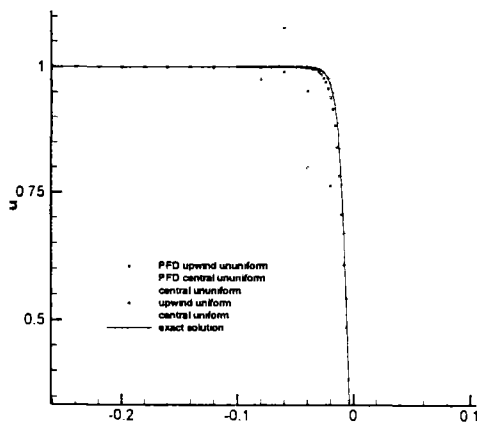


图 7.Burgers 方程 Re=200 数值结果比较(局部放大)

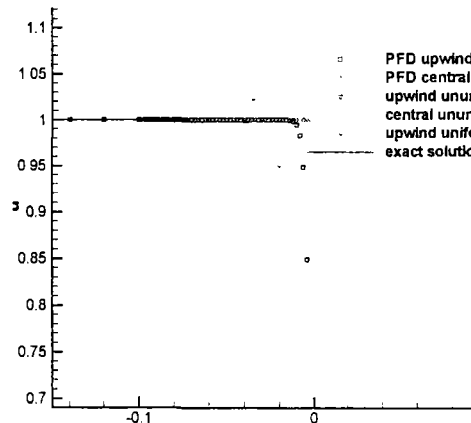


图 8.Burgers 方程 Re=1000 数值结果比较(局部放大)

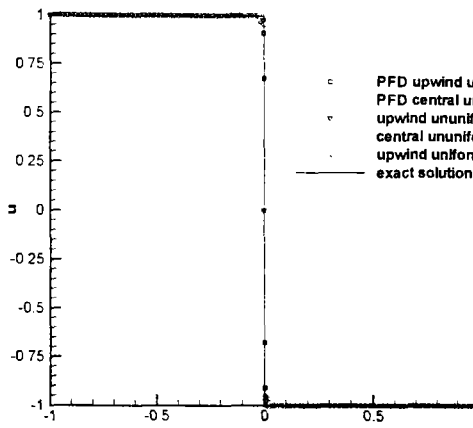


图 9. Burgers 方程几种格式数值结果比较. $Re=1400$

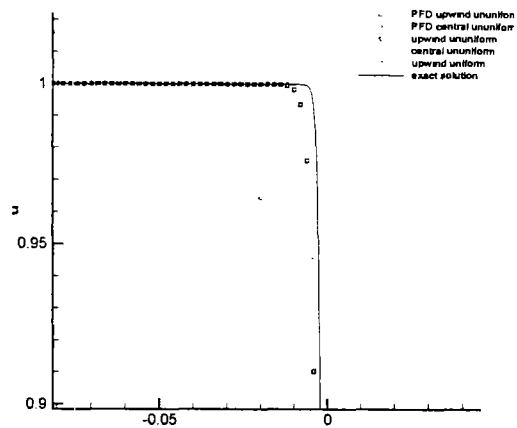


图 10. Burgers 方程 $Re=1400$ 数值结果比较(局部放大)

参考文献

- [1] Gao Z. "An infinite-order accurate upwind compact difference scheme for the convective diffusion equation." :Proc. of Asia Workshop on Computational Fluid Dynamics. Sept, 1994, Sichuan, China
- [2] 高智. "摄动有限差分方法研究进展". 力学进展, 第 30 卷, 第 2 期, 200~215
- [3] 忻孝康等 "定常对流扩散方程的修正积分因子方法", 水动力学研究与进展, Sept., 1993, Vol. 8, No. 3