

摄动差分法对有源对流扩散方程 计算精度的提高

曾方军^{1,2}, 舒适¹, 李明军¹, 高智²

(1. 湘潭大学, 数学与计算科学学院, 湖南湘潭, 411105)

(2. LHD, 中国科学院力学研究所, 北京海淀, 100190)

摘要 对流扩散方程中函数源项的存在能使许多格式产生假扩散,许多格式计算有源对流扩散方程所产生的数值误差比计算齐次对流扩散方程的误差要大很多。本文研讨高智数值摄动差分法能否减轻上述假扩散的问题;通过对流项和源项同时摄动,摄动后格式的整体精度与未摄动格式相比有了很大的提高,这是摄动格式较其他格式的一条优良特性;本文最后通过数值实验证实了数值摄动差分法的这条优良特性。由于具有工程价值的对流扩散型方程(例如 Navier-stokes 方程组)都是有源的,因此将数值摄动差分法的这条优良特性应用到工程计算中去将会产生重要的实用价值。

关键词 数值摄动差分法, 计算流体力学, 对流扩散方程, 函数源项

引言

对流扩散型方程是流体力学中一类基本的数学物理方程,如流体运动的NS方程组就是对流扩散型方程,在描述实际问题时基本上所有的方程都含有函数源项。已有对流扩散型方程计算格式的研究,对函数源项离散方法的研究还不很深入且看法不同,有人认为函数源项的存在对离散方程的计算精度毫无影响;但是已有研究[1-3]表明,函数源项的存在能够在计算过程中引起假扩散,有时甚至还会引起较大的数值误差;文献[1]中Leonard写道:“One would have to take great care to generalize a finite-difference algorithm based on partial first-order upwinding to take account of the unsteady effects,cross-grid transport,and explicit Source Terms,all of which are missing in currently popular techniques.”;文献[2]中指出函数源项的存在会使很多格式产生假扩散现象,并把建立差分格式时没有考虑到函数源项的影响作为引起较大数值计算误差的原因之一,指出用具有精确解格式的指数格式计算也会产生较大的数值误差,本文进一步证实了这一事实;文献[3]同样指出源项在离散时取节点的时段初值相当

于在格式中加入了反扩散,易生假振,也存在数值误差。目前人们对函数源项的离散处理大都只是对源项进行线性化处理[2,4],但这种处理只能提高格式的稳定性 and 加快解的收敛速度,对源项所产生的假扩散起不到减轻作用。因此对有源对流扩散方程研究能够提高计算精度的算法和格式显得十分必要;由于数值摄动差分法对精度的提高是整体精度的提高[8-10],高智教授建议利用数值摄动差分法应该能提高有源对流扩散方程的计算精度,本文通过研究和数值计算证实了数值摄动差分法[5-7]确实能对有源对流扩散方程的计算精度起到一定的提高作用。

1994年,高智教授提出数值摄动差分法[7],从起初的三节点格式的全域摄动,到现在的三节点、多节点格式的全域和间断摄动[8-10],这些格式在模型方程和流动计算中获得了很大的成功[11-12]。本文利用一阶迎风(1UDS)、二阶中心(2CS)、三阶迎风(3UDS)格式及其已有的摄动格式[7-9]和四阶中心(4CS)及本文利用数值摄动差分法推导的4CS的摄动格式对含函数源项对流扩散方程进行了计算,数值结果表明数值摄动差分法能使含函数源项对流扩散方程的计算精度有所提高。

数值摄动差分法简介

数值摄动差分法在有源对流扩散方程中应用的思想：在微分方程差分离散格式中，对流项和源项同时摄动重构为步长 Δx 的幂级数，利用微分方程本身提供的高阶线性流体力学关系，再通过消除摄动修正微分方程的截断误差诸项的方法求出幂级数的系数，进而获得高精度摄动差分格式。

设含源项对流扩散模型方程为：

$$u \frac{\partial \phi}{\partial x} = \gamma \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + S \quad (1)$$

根据文献[7-9],对(1)中对流项分别用一阶迎风、二阶中心、三阶迎风和四阶中心格式离散，扩散项用二阶中心格式离散得到：

$$\left. \begin{aligned} & \left. \begin{aligned} & (1-\alpha)(\phi_{i+1} - \phi_i) + (1+\alpha)(\phi_i - \phi_{i-1}) \\ & (\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) \\ & (1+\alpha) \frac{2\phi_{i+1} + 3\phi_i - 6\phi_{i-1} + \phi_{i-2} +}{6} \\ & (1-\alpha) \frac{-2\phi_{i-1} - 3\phi_i + 6\phi_{i+1} - \phi_{i+2}}{6} \\ & \frac{8(\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) - (\phi_{i+2} - \phi_{i-2})}{12} \end{aligned} \right\} \\ & \frac{u_i}{2\Delta x} \end{aligned} \right\} (2)$$

$$= \gamma \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{\Delta x^2} + S_i$$

其中 $\alpha = \text{sign}(u_i)$ 。

对格式(2)中的对流项和源项 S_i 进行摄动重构：

$$\left. \begin{aligned} & \left. \begin{aligned} & G_{1uc} [(1-\alpha)(\phi_{i+1} - \phi_i) + (1+\alpha)(\phi_i - \phi_{i-1})] \\ & G_{2cc} (\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) \\ & G_{3uc} [(1+\alpha) \frac{2\phi_{i+1} + 3\phi_i - 6\phi_{i-1} + \phi_{i-2} +}{6} \\ & (1-\alpha) \frac{-2\phi_{i-1} - 3\phi_i + 6\phi_{i+1} - \phi_{i+2}}{6}] \\ & G_{4cc} [\frac{8(\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) - (\phi_{i+2} - \phi_{i-2})}{12}] \end{aligned} \right\} \\ & \frac{u_i}{2\Delta x} \end{aligned} \right\} (3)$$

$$= \gamma \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{\Delta x^2} + \begin{Bmatrix} G_{1us} S_i \\ G_{2cs} S_i \\ G_{3us} S_i \\ G_{4cs} S_i \end{Bmatrix}$$

其中：数值摄动重构诸函数 $G_{1uc}, G_{2cc}, G_{3uc}, G_{4cc}$ 和

$G_{1us}, G_{2cs}, G_{3us}, G_{4cs}$ 为

$$\begin{cases} G_{1uc} = 1 + \sum_{i=1}^n A_{ci} \Delta x^i, & G_{1us} = 1 + \sum_{i=1}^n A_{si} \Delta x^i \\ G_{2cc} = 1 + \sum_{i=1}^n B_{ci} \Delta x^i, & G_{2cs} = 1 + \sum_{i=1}^n B_{si} \Delta x^i \\ G_{3uc} = 1 + \sum_{i=1}^n C_{ci} \Delta x^i, & G_{3us} = 1 + \sum_{i=1}^n C_{si} \Delta x^i \\ G_{4cc} = 1 + \sum_{i=1}^n D_{ci} \Delta x^i, & G_{4cs} = 1 + \sum_{i=1}^n D_{si} \Delta x^i \end{cases} (4)$$

将(4)式代入重构格式(3)，再将 $\phi_{i\pm 1}, \phi_{i\pm 2}$ 对 i 点作Taylor展开，利用冻结对流项系数和源项的条件下导出的高阶导数到一阶导数的递推公式：

$$\frac{\partial^n \phi}{\partial x^n} = \left(\frac{u_i}{\gamma}\right)^{n-1} \frac{\partial \phi}{\partial x} - \left(\frac{u_i}{\gamma}\right)^{n-2} S_i \quad (5)$$

通过消除摄动重构格式修正微分方程截断误差诸项，即令摄动重构格式修正微分方程中 Δx^n 的系数为零，文献[7-9]给出的 $G_{1uc}, G_{1us}, G_{2cc}, G_{2cs}, G_{3uc}, G_{3us}$ 和本文计算导出的 G_{4cc} 和 G_{4cs} ，分别为：

$$\begin{cases} G_{1uc} = G_{1us} = 1 + \frac{\alpha}{2} R_{\Delta x_i} + \frac{1}{6} R_{\Delta x_i}^2 + \frac{\alpha}{24} R_{\Delta x_i}^3 + \frac{1}{120} R_{\Delta x_i}^4 \\ G_{2cc} = G_{2cs} = 1 - \frac{1}{12} R_{\Delta x_i}^2 + \frac{1}{120} R_{\Delta x_i}^4 - \frac{17}{20160} R_{\Delta x_i}^6 \\ G_{3uc} = G_{3us} = 1 + \frac{1}{12} R_{\Delta x_i}^2 - \frac{\alpha}{12} R_{\Delta x_i}^3 + \frac{13}{360} R_{\Delta x_i}^4 \\ G_{4cc} = G_{4cs} = 1 + \frac{1}{12} R_{\Delta x_i}^2 + \frac{1}{360} R_{\Delta x_i}^4 + \frac{137}{20160} R_{\Delta x_i}^6 \end{cases} (6)$$

其中 $R_{\Delta x_i} = u_i \Delta x / \gamma$ 为网格Reynolds数。

再将(6)式代入(3)式即可得到一阶迎风、二阶中心、三阶迎风、四阶中心的摄动格式。

数值实验

用一个算例检验了函数源项能够引起假扩散以及三个算例验证了数值摄动差分法对有源对流扩散方程计算精度的提高。算例1用具有精确解格式的指数格式分别计算了含常数源项和函数源项的线性常系数对流扩散方程，数值结果证实了函数源项确实能够引起假扩散现象。算例2分别利用一阶迎风、四阶中心、三阶迎风格式及其摄动格式计算了常系数含函数源项的对流扩散方程。算例3分别利用二阶中心、四阶中心、三阶迎风格式及其摄动格式计算了变系

数含函数源项的对流扩散方程。最后算例4用二阶中心和四阶中心格式及其摄动格式计算了二维算例；数值结果均证实了数值摄动差分法对有源对流扩散方程的计算精度起到提高作用。算例1,2,3,4均用Gauss-Seidel迭代方法求解，收敛准则是 $\max_i |\varphi_i^{n+1} - \varphi_i^n| < 1.0 \times 10^{-10}$ 和 $\max_{i,j} |\varphi_{ij}^{n+1} - \varphi_{ij}^n| < 1.0 \times 10^{-10}$ ，其中 n 是迭代次数。

算例 1

$$\begin{cases} -\varepsilon \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} = C, & x \in [0,1] & (1) \\ -\varepsilon \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \varepsilon \frac{9\pi^2}{4} \sin \frac{3\pi x}{2} + \frac{3\pi}{2} \cos \frac{3\pi x}{2}, & x \in [0,1] & (2) \end{cases}$$

其中方程 (1) 是含常数源项的对流扩散方程，解析解为 $\varphi(x) = Cx + (e^{x/\varepsilon} - 1) / (e^{1/\varepsilon} - 1)$ ，取 $C=1$ ，方程 (2) 是含函数源项对流扩散方程，解析解为 $\varphi(x) = (e^{x/\varepsilon} - 1) / e^{1/\varepsilon} - 1 + \sin 3\pi x / 2$ ，方程 (1)、(2) 计算中取 $\varepsilon = 0.005$ ，边界同时取真解的值，方程 (1)，(2) 同时采用指数格式计算。计算结果见表1和图1、2，其中图1、2的网格数均为20。

表 1 方程 (1) 和 (2) 用指数格式计算的 $L_2 error$ 和 $L_{\max} error$ 比较

N	$L_2 error(1)$	$L_2 error(2)$	$L_{\max} error(1)$	$L_{\max} error(2)$
20	4.4460e-11	1.2703e-01	9.2750e-11	1.8859e-01
40	2.7761e-11	4.9369e-02	8.4885e-11	7.2310e-02

其中： $L_2 error(1)$ 表示方程(1)计算的 $L_2 error$ ， $L_2 error(2)$ 表示方程(2)计算的 $L_2 error$ ， $L_{\max} error$ 类似。

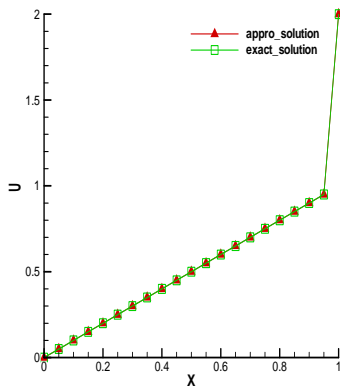


图 1 方程 (1) 用指数格式计算的结果与精确解比较

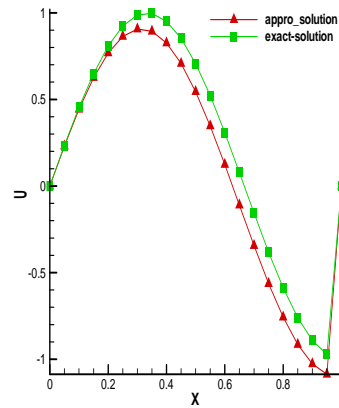


图 2 方程 (2) 用指数格式计算的结果与精确解比较

数值结果表明用指数格式计算含常数源项对流扩散方程与计算齐次对流扩散方程一样能得到近似的真解，而计算含函数源项对流扩散方程时数值误差很大，说明函数源项使指数格式产生了较大的假扩散。

算例 2

$$-\varepsilon \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial \phi}{\partial x} = \varepsilon \pi^2 \sin \pi x + \pi \cos \pi x, \quad x \in [0,1] \quad (3)$$

方程(3)的解析解为

$\phi(x) = \sin \pi x + (e^{x/\varepsilon} - 1) / (e^{1/\varepsilon} - 1)$ ，计算中取 $\varepsilon = 0.005$ ，边界取真解值，扩散项离散均用二阶中心格式，对流项分别用一阶迎风格式、四阶中心格式、三阶迎风格式及其摄动格式离散，计算结果见表2和图3、4，其中图3、4网格数分别为100、140。

表 2 1UDS、3UDS、4CS 及其摄动格式(1UDPS、3UDPS and 4CPS) $L_2 error$ 和 $L_{max} error$ 比较

N	L_2 (1UDS)	L_2 (1UDPS)	L_{max} (1UDS)	L_{max} (1UDPS)
160	1.8452e-02	2.4865e-03	1.4703e-01	4.1586e-03
320	1.0241e-02	6.2082e-04	8.6095e-02	1.0319e-03
	L_2 (3UDS)	L_2 (3UDPS)	L_{max} (3UDS)	L_{max} (3UDPS)
320	5.6078e-04	2.9028e-04	5.7027e-03	1.6989e-03
640	2.0565e-04	1.0883e-04	2.1343e-03	2.3269e-04
	L_2 (4CS)	L_2 (4CPS)	L_{max} (4CS)	L_{max} (4CPS)
320	1.3234e-03	7.0950e-04	1.3282e-02	1.1604e-03
640	2.9766e-04	1.6127e-04	3.0904e-03	2.6364e-04

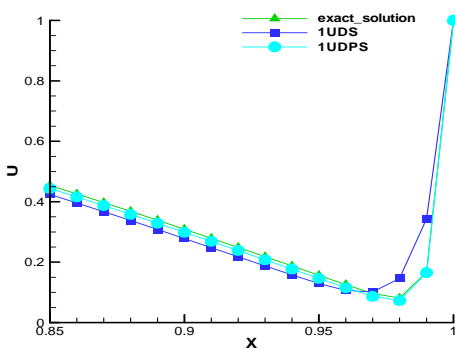


图 3 一阶迎风及其摄动格式计算的解与真解比较

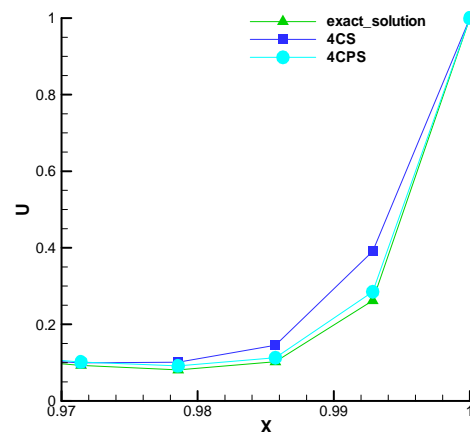


图 4 四阶中心及其摄动格式计算的解与真解比较

数值结果表明摄动后的格式与未摄动的格式相比最大误差减小了一到两个数量级左右，均方根误差减小了一个数量级左右。

算例 3

$$\varepsilon u_{xx} - \frac{1}{1+x} u_x - \frac{1}{2+x} u = \left(\varepsilon - \frac{1}{1+x} - \frac{1}{2+x} \right) e^x - \frac{1}{2+x} 2^{-\frac{1}{\varepsilon}} (1+x)^{\frac{1}{\varepsilon}}, \quad x \in [0,1] \quad (4)$$

方程 (4) 的解析解为 $u(x) = e^x + 2^{-1/\varepsilon} (1+x)^{1+1/\varepsilon}$ ，计算中取 $\varepsilon = 0.005$ ，边界取真解值，扩散项离散均用二阶中心格式，对流项分别用二阶中心格式、四阶中心格式、三阶迎风格式及其摄动格式离散，计算结果见表3和图5、6，其中图5、6的网格数分别为70、100。

表 3 2CS、3UDS、4CS 及其摄动格式 (1UDPS、3UDPS and 4CPS) $L_2 error$ 和 $L_{max} error$ 比较

N	L_2 (2CS)	L_2 (2CPS)	L_{max} (2CS)	L_{max} (2CPS)
320	8.1962e-04	1.1486e-04	6.0764e-03	2.0119e-04
640	2.0379e-04	2.7936e-05	1.5066e-03	4.7299e-05
	L_2 (3UDS)	L_2 (3UDPS)	L_{max} (3UDS)	L_{max} (3UDPS)
320	5.6759e-04	2.9825e-04	4.1943e-03	1.9138e-03
640	1.6917e-04	5.2820e-05	1.2498e-03	2.9419e-04
	L_2 (4CS)	L_2 (4CPS)	L_{max} (4CS)	L_{max} (4CPS)
320	8.2461e-04	1.2305e-04	6.0920e-03	2.0330e-04
640	2.0094e-04	3.2843e-05	1.4843e-03	6.7986e-05

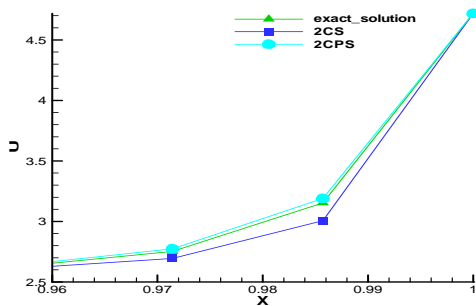


图 5 二阶中心及其摄动格式计算的解与真解比较

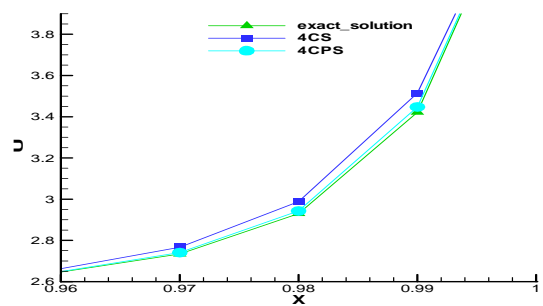


图 6 四阶中心及其摄动格式计算的解与真解比较

数值结果表明摄动后的格式与未摄动的格式相比最大误差减小了一到两个数量级左右，均方根误差减小了一个数量级左右。

算例 4

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \omega \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \omega \cos x + \sin x \quad x, y \in [0,1] \quad (5)$$

方程 (5) 的解析解为 $\varphi(x, y) = (y(1-y) - 2x/\omega)e^{-\omega x} + \sin x$ ，边界取真解值，计算中取 $\omega = 40$ ，扩散项用二阶中心格式离散，对流项分别用二阶中心、四阶中心及其摄动格式离散，计算得到的数值结果见表4。

N×N	L ₂ (2CS)	L ₂ (2CPS)	L _{max} (2CS)	L _{max} (2CPS)
20×20	5.3111e-03	2.1409e-03	3.3824e-02	8.6658e-03
40×40	1.2594e-03	5.4148e-04	8.6490e-03	9.4653e-04
80×80	3.0433e-04	1.4019e-04	1.9733e-03	2.3923e-04
	L ₂ (4CS)	L ₂ (4CPS)	L _{max} (4CS)	L _{max} (4CPS)
20×20	1.2906e-02	9.7173e-03	9.0252e-02	6.2900e-02
40×40	1.5952e-03	7.7335e-04	1.1837e-02	3.9796e-03
80×80	3.1841e-04	1.4212e-04	2.1037e-03	3.6919e-04

表 4 2CS、4CS及其摄动格式(2CPS、4CPS) $L_2 error$ 和 $L_{max} error$ 比较

数值结果表明摄动后的格式与未摄动的格式相比最大误差和均方根误差均减小了一个数量级左右。

结论

由于很多格式计算有源对流扩散方程时，函数源项将引起假扩散产生大的数值误差现象，本文研讨了高智数值摄动差分法能否避免上述现象的问题。通过对流项和源项同时摄动，摄动后离散格式的整体计算精度得到了提高，数值实验证实数值摄动差分法对有源对流扩散方程的计算精度起到了提高作用，数值结果表明摄动后的格式与未摄动的格式相比最大误差要小一到两个数量级，均方根误差要小一个数量级左右，为减轻非常数源项引起的假扩散提供了一条有效的途径。由于现在大部分计算流体力学(CFD)软件都是由一阶迎风和二阶中心格式编写的，故将源项和对流项同时摄动后的一阶迎风和二阶中心格式应用到CFD软件中去将会产生很好的实用价值。

致谢 该课题是在数值摄动差分算法提出者高智教授的建议下开展研究的，特此致谢！

参考文献

- [1] Leonard B P. A stable and accurate convection molding procedure based on quadratic upstream interpolation. *Comput Meth Appl Mech Eng*, 1979, 29:59-98
- [2] 陶文铨. 数值传热学(第2版). 西安: 西安交通大学出版社, 2001
- [3] 谭维炎. 计算浅水动力学. 北京: 清华大学出版社, 1998
- [4] 马辉, 王发民. 高温化学非平衡计算中源项处理方法. *北京航空航天大学学报*, 2004, 30(7):679-681
- [5] 高智. 摄动有限差分方法研究进展. *力学进展*, 2000, 30(2):200-215
- [6] 高智. 数值摄动算法及其CFD格式. *力学进展*, 2010, 40(6):607-633
- [7] Gao Z. An infinite-order accurate upwind compact difference scheme for the convective diffusion equation. *Proc. of Asia Workshop on Computational Fluid dynamics. Sichuan, China, 1994. 18-24*
- [8] 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, 42(5):811-817
- [9] 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*, 2010, 25(3):307-315
- [10] 朱可, 李明军. 对流扩散方程Quick格式的数值摄动高精度重构格式. *力学学报*, 2011, 43(1):55-62
- [11] Gao Zhi, Yang Guowei. Perturbational finite volume algorithm for the convection diffusion integer equation. *Acta Mechanica Sinica*, 2004, 6:580-590
- [12] 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

**Numerical perturbation difference
algorithm for improve the accuracy of the
convective-diffusion equation with source
term**

Zeng Fang-jun^{1,2}, Shu-Shi¹, Li Ming-jun¹, gaozhi²

(1. School of mathematics and computational science, Xiangtan university, Hunan, 411105)

(2. Institute of Mechanics, Chinese Academy of science, Beijing 100080)

Abstract The existence of the function source term in convective-diffusion equation makes many schemes produce false diffusion. The numerical error generated by many schemes in the computation of convective-diffusion equation that contains source term is much great than those computation of the homogeneous convective-diffusion equation. In this paper, we discuss whether the Gao Zhi numerical perturbation difference algorithm can alleviate the false diffusion mentioned above. The whole accuracy of schemes after perturbation has been great improved by perturbing both the convection term and source term when compared with the schemes without perturbation, which is the excellent properties of the perturbation scheme. Finally we proved the properties of numerical perturbation difference algorithm through numerical tests. Since that the convective-diffusion equations (such as the Navier-stokes equations) of important value in the engineering are almost have source term, then we can apply the excellent properties of the numerical perturbation difference algorithm into the computation of engineering, which will bring important practical value.

Key words numerical perturbation difference algorithm, computational fluid dynamics, convective-diffusion equation, function source term