用有限差分法计算非线性气体波动问题的一些难点

北京大学数学研究所　黄　敦

一、两类题目：数值模拟与数值试验

用有限差分法来进行数值计算的气体非线性波的题目可分两类。第一类是用于模拟重大科技项目提出的复杂现象，诸如：激波绕射〔1—3〕、超临界翼周围的流场、超音速射流遇固壁后发生的由激波、膨胀波、切向间断、自由表面等组成的复杂波系……，题目多种多样不胜枚举。这类题目不用数值方法就难于求得定量的结果，而数值方法也很不简单。第二类是与研究计算方法有关的、具有准确分析解的典型题目，例如等速定常激波、黎曼初值问题〔4,6,7〕。定常激波遇固壁后的正反射〔5〕、无粘的Burgers方程等等。第二类题目比第一类题目简单得多，因而找到了非线性方程的准确的或高精度的分析解，但用数值方法来做也并不十分易行，仍然要遇到非线性的困难和未知函数多的困难。在提出新的计算非线性波的数值方法时，为分析考察新的方法，总要用第二类的典型问题来试算，即所谓“数值试验”。这类题目一直是计算方法的良好的检验关卡。很多新的方法或格式的重大的（当然不是全部的）特点如稳定性条件、弥散、耗散、过跳、不足、熵迹、激波过渡层等或者是格式的弱点正可以与标准答案相比，进行仔细观察、分析，从而可找到改进的方向及思路。

二、间断的处理

以上两类题目的一个共同困难就是对激波(冲击波)、接触间断、弱间断（函数本身连续、但导数有间断）的处理。上述第一类课题中究竟有几个间断，间断又如何传播并相互作用，间断发生于何时、何处都不易直接从初值、边界条件中一下子判明。这是非线性双曲型方程组的特点之一。这是因为即使初值函数充分光滑，一般来说经过一段时间仍可能产生强间断〔6—8〕。如果将方程组线性化，这些特点也就大为失真了。

如果间断面为数不多，那么在一维不定常问题中可以用特征线法〔7，8〕、激波装配法〔9〕、分离奇性法〔10〕等对每个强间断单独予以处理。计算结果较准、也省机时。

针对复杂的多个间断的题目1950年von Neumann为简化计算提出人工粘性的概念。1954年P.D.Lax提出非线性双曲型方程组弱解的概念和守恒形式。Гельфанд与Годунов等提出带有格式粘性的方法（也就是差分格式的截断误差项本身就起着人工粘性的作用）。自从引进这些概念以后，近30年来出现了多种有限差分格式，用得很广。这类格式并不把间断看作边界，不写、不利用间断上的条件，而是将微分方程的解出现间断的那些网格与解保持连续的那些大量网格的计算统一起来，作法基本一样，所以很多人称之为“穿行法”。这样做与细致处理间断的方法相比，在程序中少了很多

判断，也不必分门别类地、细致地处理很多个不同的间断面，因此计算程序的结构大为简化。这样作的优点是明显的：排程序较省时间，出错的可能减少，调程序也快。这样做的代价是网格要分得多些，较费机器计算时间，并且人工粘性或格式粘性会引起数值解的准确度问题。不够深入理解这类做法的人有可能难于很正确地解释和使用数值解的结果：不是过高地估计计算准确度，就是低估数值解的用处。为弄清这些问题要靠“数值分析”与“数值试验”，两者相辅相成。

三、其他难点

1. 如果空间自变量多于一个，那么运动图案与一维不定常问题相比就有定性的改变。二维不定常气体运动中在速度梯度很大的地方如边界层、接触间断等处气体的粘性会起显著的效应，它可能引起湍流或不附壁的脱体流动或出现切向间断的卷曲。马赫波(三叉波)后有切向间断，这类现象就不易描述好。

2. 空间自变量是从一个增加到两个，第二个空间方向总得分足够多个网格，再加上要处理新的性质不同的流动现象，存储的数据会增加几十倍甚至更多。机器存贮量小了就算不了。我国很多计算机的存贮量常常客观上限制了模拟不少重要但较复杂的现象。在有较好机器的条件下，有人为算一个波动现象，把巴掌大小的一个空间区域分成七千多个网格。有的题目要用二十万个网格。这对计算机的容量与计算时间是一个很大的挑战。

3. 边界形状的复杂。边界形状对整个流动常常影响甚大。从力学实验作实际观察可以知道截面圆形的金属丝在气流中受到的阻力可以与比它截面大上百倍的流线型物体相差无几。超临界翼型(与凤尾鱼形状有些象)与传统的翼剖面形状很不同，空气动力性能就大不一样。这些形状的差别在数值计算中只影响到边界形状、边界条件，而对方程组毫无影响，可见边界形状影响之大。至今从数值分析的角度看，非线性双曲型方程组数值解法的边界处理是较难作出严格分析的。为适应复杂的边界形状及间断面的复杂运动，十多年来对不规则活动网格的尝试做了不少研究，至今尚不成熟，还总结不出有指南性的结论〔11〕。

4. 混合型问题。某些带激波的气体力学题目中，在计算区中的一部分（其边界亦待求）方程组呈椭圆型，而在另一区中则呈双曲型，这也使计算更为困难。1952年数学家彼得罗夫斯基就建议化成带时间的双曲型方程组的问题来做这类课题。当时间充分大，运动状态基本不再随时间变更时的解就作为混合型问题的解。С. К. Годунов 1961年首先实现了这种做法。这类做法近年用得很广，叫作时间稳定法或别的名称(尚未有统一的中文名称)。这个思路也有些象用热传导方程求时间极大增长以后的渐近状态，最终就得到拉普拉斯方程的解。

这样做多引进了时间自变量，但边界条件及数学问题更易提，存贮的数据常常可以减少。用性能好的计算机做跨音速的钝头翼栅问题或是火箭尾端出来的射流遇地面后形成的复杂波系都是早已切实可行的了〔11〕。

5. 新的化学或物理的因素。力学中“抓主要舍次要”一直是重要的不可避免的方法。60—70年代实验进步了，发现爆轰波阵面是复杂的不定常的波系。1965年Williams

关于燃烧的专著提出了不少数学问题以待解决〔12〕。A.J.Chorin 1976及1977的两篇文章〔13〕中提出了可行的新路子以便用双曲型的数学模型处理包括爆轰及爆燃(deflagration)等化学变化与高速气流两种效应都很重要的现象。这里有两重以上的困难。一方面是化学反应的时间尺度与气流的时间尺度不同。如果很仔细计及化学反应，那么用这样的时间尺度来算流动状况就会太费时间及计算经费。另一方面爆燃与爆轰速度也差多倍。〔13〕的思路甚为新颖。为此1977年春P.D.Lax组织了"燃烧理论"讨论班。其11讲，印成300页篇幅的讲义〔14〕。〔13〕中的方法属于穿行法，但既不带人工粘性，也不带格式粘性，导数也不用差商代替。所以与传统的穿行法很不同。这个算法主要是将Glimm的关于双曲型非线性方程组初值问题存在性问题的证明〔15〕中的思路予以推广改变。改变之一是冲破Glimm证明中对初值的苛刻限制。改变之二是把每个网格都要做的基本步骤，即黎曼初值问题，加以推广：推广到可以计及化学反应。这两个改变都很重要，由于计算时要用到随机数列来选取函数值，这种方法就起名为"随机选取法"(random choice method)或Glimm-Chorin方法。1978年一篇总结性文章〔16〕中它受到突出的推荐，被誉为理论研究前缘的典型例子。关于随机选取法近两年有不少论述与发展，例如〔17—21〕。最近收到的研究报告〔45〕成功地模拟了火焰到爆轰的转变。

四、分步法

为克服多维的难点及计及传热、粘性、化学反应等等效应可采用分步法(method of fractional steps)，即将一个微分算子折成若干个只含一两个自变量的简单得多的算子。要折得合适，使总起来仍能使原始的方程得到正确的而不是歪曲的答案。分步法是发展了20多年的一种方法〔22—28〕。分步法有很多好处：如①总体的问题作差分格式稳定性分析甚为困难。如不作稳定性分析则计算就缺少根据，有盲目性。如果恰当地分成几步而又如果每一步都稳定，则总起来也稳定，亦即某种范数不增长。所以稳定性条件较易推出。②程序可以由若干个"程序包"组成。这样当发现应该修改程序中的一个组成部分的时候，不必大动整个程序。这对细致的费工的编程序、改程序及调程序都是方便的：既省工、又省时间与经费。

五、关于数学基础

关于气体非线性波的数值计算，早在电子计算机出现以前就有数学家从事其奠基工作。大量的计算提出不少新经验、新问题。数值计算的理论也在发展。有很多较好的专著如〔7,10,11,24,25,27—35〕。但是也要看到气体非线性波动的偏微方程组中的方程的个数多，非线性项甚多，边界条件还引起不少难点。理论虽多但离开实际需要还常有距离。遇到新的现象、新的运动图案、新的题目，常感已经有的理论不够用，随之而提出很多待探索的、难度不小的问题。发展至今，在处理非线性气体波动问题时，仍然是一把钥匙开一把锁。正如一块多种色采的玉石交给能工巧匠，他还得作创造性的安排才能雕刻成艺术珍品。

线性弹性力学问题10年前就有通用程序，一个个大型通用程序不断出现。对于非线性气体波动问题，费很大力量编出的程序常常只能做有限的一小批题目。离开编制通用程序的日期似尚甚远。

非线性气体波动问题不断向数学家提出问题，数学家从气体力学的典型解中得到很多营养与启发，几十年来第一流的数学家们都非常关心气体力学非线性问题，以致不少国家学习应用数学的研究生多半都要上流体力学的课程。

六、自模拟解作为典型检验题目的不足

很多用于数值试验的典型题目如〔4—6〕中的题目有一个共同的特点就是题目中没有特征长度、特征时间。根据量纲分析的理论就可以证明激波等各种波都只会以等速传播，波前与波后一个区域内气流的运动学及热力学参量都没有梯度。这些自模拟问题是公认的好的考验方法的题目，它们也有不足之处。突出的一点是用它们检验穿行法对于激波或接触间断的计算。如果出现计算误差（二阶或三阶〔38〕格式出现有如孤立波类型的抖动）则这些误差向左、向右传得不远就没有影响了。这样关于方法的有些特点或缺点就发现不出来。原因在于间断前后没有梯度的区域数据会反过来使计算误差减小。实际问题中一般并不这样。因此误差会不全一样。

此外有第二方面：既然这类题目没有特征长度则空间步长对计算结果准确度的影响就显不出来。

这两方面都是将平面自模拟解作为典型问题用来检验新出现的方法时的不足之处。

为了考察、检验各计算气体非线性波的方法，作者提出了带激波传播的高准确度（三位或四位有效数字）的分析解〔37〕。这个解相当于平面强爆炸波遇固壁的不定常正反射。这个题目中有特征长度、特征时间，因此激波以变速传播，波前、波后的压力、密度尤其是质点速度都显著地随空间变量而改变。因此数值解出现的现象与自模拟题目中出现的很有差别。用这个典型题目我们检验、考察了 Годунов 格式、随机选取法、随机选取差分法、FLIC 方法、Русанов 方法、分离奇性法、Mac Cormack 方法、Lax-Wendroff方法及该法加上Boris与Book 新近提出的人工压缩法〔18,21,38—45〕。总的说来激波附近的数值解的情况与〔4，5〕所说的不太相同。例如对 Русанов 方法作线性化以后的稳定性分析所得到的稳定性条件（见〔2〕）不完全满足的情况下，有的例子中，数值解的误差增长很快导致数据溢出，有的例子中数值解的误差是波长很短振幅总也不太增长的摆动，这种摆动很像一串孤立波〔41〕。这个典型题目还有固壁处的边界条件。在固壁附近的低速区，有的数值方法结果好，有的则不够好：密度、熵和温度的误差显著，然而压力却还不错。改进的方法也各不相同。例如 FLIC 方法要求在小速度区多加些人工粘性，相反 Русанов 方法则应全然扣除粘性。这些改进的办法既有数值试验也有数值分析予以支持〔40，41〕。笔者以为很值得做些另外的有分析解的典型题目，用以检查非线性气体波动的数值计算方法。

参考文献

〔1〕 Witham,G.B.(1974),Linear and Nonlinear Waves, John Wiley & Sons.

〔2〕 Русанов,В.В.(1961),Расчет взаимодействия нестационарных ударных волн с препятствиями, Ж.выч.мат.мат.физ., 1:267—279.

〔3〕 李文绚、黄录平、王家浚、陈志林（1980），关于计算二维不定常空气动力学的 Русанов 格式，（一），（二），高等学校计算数学学报，第一、二期。

〔4〕 Sod, G. A. (1978), Review. A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws, *J. Comp. Phys.*, **27**, 1:1—30. 或见 Кочин, Н.Е. (1925), К теории разрывов в жидкости, Собрание сочинений, том II, Издат. АН СССР (1949), 1—24（主要有关段落为32—40）。

〔5〕 Шокин, Ю.И. (1979), Метод дифференциального приближения, «Наука», Новосибирск: 164, 169, 182.

〔6〕 Riemann, R. (1892), Ueber die fortpflanzung ebener luftwellen von endlicher schwingungsweite, Gesammelte Mathematische Werke, Leipzig, Teubner, Ⅷ.

〔7〕 Courant, R. and Friedrichs, K. O. (1948, 1976), Supersonic Flow and Shock Waves, Interscience Publishers, New York.

〔8〕 北京大学数学系激波计算组(1975)，变截面管道中激波的传播及新激波的产生和发展，中国科学，**18**，6。

〔9〕 Охоцимский, Д.Е., Кандрашева, И.Л., Власов, З.П., Казакова, Р.К. (1957), Расчет точечного взрыва с учетом противодавления, Труды Матем. ин-та АН СССР, том 50.

〔10〕 朱幼兰、钟锡昌、陈炳木、张作民(1980)，初值问题差分方法及绕流，科学出版社。

〔11〕 Годунов, С.К., Забродин, А.В., Иванов, М.Я., и др. (1976), Численное решение многомерных задач газовой динамики, «Наука», Москва.

〔12〕 Williams, F. A. (1965), Combustion Theory, Addison Wesley.

〔13〕 Chorin, A. J. (1976), Random choice solution of hyperbolic systems, *J. Comp. Phys.*, **22**:517.
——(1977), Random choice method with application to reacting gas flow, **25**:253.

〔14〕 Lax, P. D. and others, eds. (1978), The numerical solution of equations of fluid dynamics, in Lectures on Combustion Theory, Report, Mathem. and Computing COO-3077-153, Courant Math. and Comp. Lab., New York Univ.

〔15〕 Glimm, J. (1965), Solution in the large for nonlinear hyperbolic systems of equations, *Comm. Pure Appl. Math.*, **18**:697.

〔16〕 Parlett, B. (1978), Progress in numerical analysis, *SIAM Rev.*, **20**:3.

〔17〕 Colella,P.(1979),Dr thesis,Analysis of the effect of operator splitting and of the sampling procedure on the accuracy of Glimm's method,Univ. of Calif., Berkeley.
Woodward,P.R.and Colella,P.(1981),High resolution difference schemes for compressible gas dynamics,in Lecture Notes in Phys.141,Springer-Verlag:434—441.

〔18〕 黄敦、黄录平、樱玉芝(1980),关于随机选取法及其对不定常激波的计算,数值计算与计算机应用,1,1:34-44.

〔19〕 Lax,P.D.and Harten,A.(1980),Arandom-choice finite difference scheme for hyperbolic conservation laws, Report DOE/ER/03077-167,New York Univ.

〔20〕 滕振寰 (1981),An invisid numerical model of transition from deflagration to detonation, Report Center of Pure and Appl. Math.PAM-23, Univ.of Calif.,Berkeley.

〔21〕 雷功炎(1981)(硕士论文),关于对激波有高分辨率的几种算法,北京大学数学系.

〔22〕 Peaceman,D.W.and Rachford,H.H.(1955),The numerical solution of parabolic and elliptic equations, *Jour.Soc.Ind. Appl.Math.*,Ⅲ:28—42.

〔23〕 Годунов,С.К.и Багриновский,К.А.(1957),Разностные методы для многомерных задач,ДАН СССР,115,3:431.

〔24〕 Marchuk,G.I.(1975),Methods of Numerical Mathematics, Springer-Verlag.

〔25〕 Yanenko,N.N.(1971),The Method of Fractional Steps,The Solution of Problems in Mathematical Physics in Several Variables,Springer-Verlag.

〔26〕 Mac Cormack,R.W.(1969),The effect of viscosity in hypervelocity impact cratering,AIAA Paper No. 69-354.

〔27〕 Richtmyer, R.D.and Morton,K.W.(1967),Difference Methods for Initial-Value Problems,Interscience Publishers.

〔28〕 Белоцерковский,О.М.,Головачев,Ю.П.,Грудницкий,В.Т.,и др.(1974),Численное исследование современных задач газовой динамики,«Наука», Москва.

〔29〕 Potter,D.(1973),Computational Physics, John Wiley &Sons.

〔30〕 Рождественский,Б.Л. и Яненко,Н.Н.(1974),Системы квазилинейных уравнений,«Наука», Москва.

〔31〕 Самарский, А. А. (1977), Теерия Разностных Схем, «Наука», Москва.

〔32〕 Годунов, С.К., Рябенький, В.С. (1973), Разностные Схемы. «Наука», Москва.

〔33〕 Roache, P.J. (1972), Computational Fluid Dynamics, Hermosa Publishers.

〔34〕 Holt, M. (1977), Numerical Methods in Fluid Dynamics, Springer-Verlag.

〔35〕 Rusanov, V.V. (1977), Advanced techniques for computating supersonic flows, Proc.15th AIAA Aero.Space Sci.Meeting, AIAA Paper, 77—173.

〔36〕 黄 敦(1979)，气体力学方程组一套高精确度的分析解，北京大学数学研究所报告。改进后的解见：爆炸与冲击，1，1(1981)。

〔37〕 黄敦、黄录平、柳玉芝(1979)，用戈杜诺夫格式计算不定常激波兼论影响数值解质量的某些因素，北京大学数学系报告。

〔38〕 黄敦、黄录平、柳玉芝、雷功炎(1980)，关于气体中平面爆炸波反射的两个问题，北京大学数学系报告。

〔39〕 季荫凡(1980)，关于FLIC方法稳定性的注记，计算数学，3:278—281.

〔40〕 黄敦、李文绚(1981)，关于Русанов格式的特点及其改进，北京大学数学研究所报告，待发表。

〔41〕 吴雄华 (1981)，分离奇性法对不定常激波的计算，中国科学院计算中心硕士论文，待发表。

〔42〕 章乃鑫(1981)，MacCormack 格式在计算不定常激波时的特点，北京大学数学系硕士论文。

〔43〕 曹亦明、李荫凡(1981)，关于 Lax-Wendroff 格式及人工压缩法，中国科学院计算中心报告。

〔45〕 黄敦、李荫凡、黄录平、柳玉芝(1981)，Two analytical solutions for the reflection of unsteady shock wave and relevant numerical tests, in Lecture Notes in Physics 141, Springer-Verlag: 218—223.

〔45〕 滕振寰，Lin, T.P. & Chorin, A.J. (1981), Riemann problems for reacting gas, with applications to transition, Center Pure Appl. Math. Report PAM-29, Univ. of Califoria, Berkeley.