

有理逼近和 Padé 逼近的高阶紧致型方法*

刘儒勋^{1,†} 刘晓平²

¹ 中国科学技术大学数学系, 合肥 230026

² 中国科技大学火灾国家重点实验室, 合肥 230026

摘要 对高阶紧致 (high order compact) 方法进行了详细的讨论和简洁的评述. 这就是: 回顾了方法的发展历史, 指出了方法优点, 分析了方法的基本特征、构造方式和应用现状, 预示了它的近期发展和研究形势. 特别地, 就方法的数学基础——有理逼近和 Padé 逼近进行了归纳. 在文章中提供了丰富的方法信息和大量的有关公式.

关键词 有理逼近, 紧致 (compact) 方法, Padé 方法, 计算流体力学方法

1 引言

长期以来, 我们所讨论的计算流体力学的数值方法, 包括文献 [1 ~ 3], 基本上都是多项式型插值逼近方法. 也就是 Lagrange, Newton 和 Hermite 插值, B-样条 (B-spline) 插值方法. 这些多项式型插值方法, 尽管你采取各种巧妙的手段去抑制, 去避免, 仍然难以克服高次逼近时的振荡机制, 即所谓的 Runge 现象 (又称 Gibbs 现象). 读者可能都曾经看到那个著名的例子, 即利用多项式逼近有理分式函数

$$f(x) = \frac{1}{1+x^2}, x \in [-5, 5]$$

在区间上取 $n+1$ 个等分节点, 作 n 次的 Lagrange 或者 Newton 插值多项式逼近. 由图 1 可见, 随插值多项式次数的增加, 其逼近函数的振荡益强. 这说明了两点: (1) 一味地过于追求高阶多项式逼近方法的格式研究, 并不值得提倡; (2) 适当的有理逼近是值得提倡的逼近形式.

本文讨论了 Compact-Type 或者 Padé-Type 方法的基本特性、构造方法和应用. 同时, 对方法的发展和研究情况, 进行了比较详细的综述和评价. 特别是论文包括了尽可能多的信息和各种需要的公式, 以提供给有兴趣的读者进行实际工作. 第 2 节是对有理逼近的紧致方法做一个比较简单的讨论. 第 3 节是有理逼近, 特别是 Padé 型逼近的原理、公式和方

法作比较细致、实用的推导. 包括基本公式、边界离散公式. 第 4 节特别对小模板的 Padé 方法进行了具体的构造和指出了其计算步骤. 第 5 节讨论和评述了当代高阶紧致方法的发展.

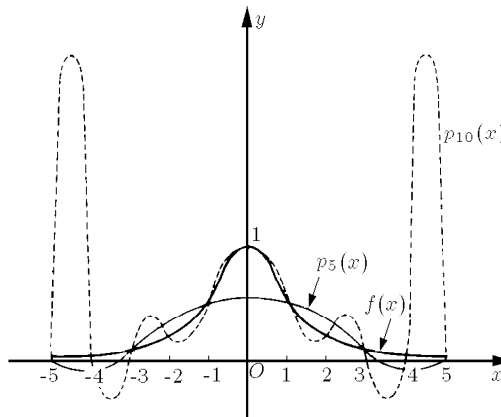


图 1 多项式逼近有理函数的 Runge 现象

2 有理逼近和 Padé 逼近介绍

有理逼近, 或者说有理函数插值逼近, 是指对于给定的一组插值点

$$\{x_i, y_i\}, i = 0, 1, \dots, n+m+1 \quad (1)$$

收稿日期: 2005-07-13, 修回日期: 2006-07-11

* 国家自然科学基金 (10371008, 90411009) 和北京计算物理所资助项目

† E-mail: liurx@ustc.edu.cn

构造有理函数插值逼近

$$\begin{aligned} R_{n,m}(x) &= \frac{P_n(x)}{Q_m(x)} \\ P_n(x) &= p_0 + p_1x + \cdots + p_nx^n \\ Q_m(x) &= 1 + q_1x + \cdots + q_mx^m \end{aligned} \quad (2)$$

使满足

$$R_{n,m}(x_i) = y_i, \quad i = 0, 1, \dots, n+m+1 \quad (3)$$

或者

$$P_n(x_i) - y_i Q_m(x_i) = 0, \quad i = 0, 1, \dots, n+m+1 \quad (4)$$

这种插值逼近, 又称为 $[n/m]$ 阶的 Padé 逼近.

一般要求它与原被插值的函数 $y(x)$ 有 $n+m+1$ 阶的精度. 即

$$\begin{aligned} y(x) - R_{n,m}(x) &= O(h^{n+m+1}) \\ h &= \max_{1 \leq i \leq n+m} \{ |x_i - x_{i-1}| \} \end{aligned} \quad (5)$$

有理插值存在的唯一问题, 以及插值的收敛性问题, 是理论分析的一个重要内容. 这与给定的插值节点特性有关. 如果有理式分子分母有公因子, 则共因子的节点称为不可达节点. 如果方程组 (4) 是满秩的, 为不可达节点, 则插值是唯一的 (等价的有理函数也认为是唯一的). 构造有理插值逼近有 Neville 算法和连分数方法. 有兴趣的读者可以找专门的参考书.

一个多项式, 总可以通过连分数方法转化为一个有理函数. 类似地, 一个 Taylor 展开级数也可以表示成有理函数. 作为一个练习, 我们考察下面的例子. 我们的积分平均定义是

$$u_i(t) = \frac{1}{h} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} u(x, t) dx, \quad h = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$$

我们可以证明有 3 阶精度的逼近

$$\begin{aligned} \bar{u}_i &= \frac{2u_{i-1/2}^2}{2u_{i-1/2} - hu'_{i-1/2}} + O(h^3) = \\ &= \frac{2u_{i-1/2}^2}{3u_{i-1/2} - hu_{i+1/2}} + O(h^3) \end{aligned}$$

证明很简单. 记

$$y(x) = \int_a^x u(x) dx$$

则连续函数 $y(x)$ 是如下方程的解

$$\begin{aligned} y' &= u(x), \quad x \in [a, b] \\ y(a) &= 0 \end{aligned}$$

取等距分割 $x_{i+1/2} = a + ih, \quad i = 0, 1, \dots, M;$
 $h = (b-a)/M.$ 我们有 Taylor 展开

$$y(x_{i-1/2} + h) = y_{i-1/2} + hu_{i-1/2} + \frac{1}{2!} h^2 u'_{i-1/2} + O(h^3)$$

对此作 $m = n = 1$ 的 Padé 逼近可得

$$\begin{aligned} R_{1,1}(h) &= \frac{P_1(h)}{Q_1(h)} \\ P_1(x) &= y_{i-1/2} u_{i-1/2} + \\ &+ h \left[u_{i-1/2}^2 - \frac{1}{2} y_{i-1/2} u'_{i-1/2} \right] \\ Q_1(x) &= u_{i-1/2} - \frac{1}{2} h u'_{i-1/2} \end{aligned}$$

从而得证

$$\begin{aligned} y_{i+1/2} &= R_{1,1}(h) + O(h^3) = \\ &= y_{i-1/2} + h \frac{2u_{i-1/2}^2}{2u_{i-1/2} - hu'_{i-1/2}} + O(h^3) \end{aligned}$$

3 有理逼近与高阶紧致 Padé 格式

早在文献 [1] 中, 就已经讨论过微商算子与差分算子的级数展开关系. 通过这种级数的展开式, 我们容易得到各阶微商节点值的差分算子的有理逼近. 在 1975 年, Hirsh^[4] 就已经采用紧致 (compact) 高阶差分格式于 CFD, 其中采用了 Padé 逼近形式

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_j &= \frac{1}{\Delta x} \frac{\mu \delta}{\left(1 + \frac{1}{6} \delta^2 \right)} u_j + O(\Delta x^4) \\ \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_j &= \frac{1}{\Delta x^2} \frac{\delta^2}{\left(1 + \frac{1}{12} \delta^2 \right)} u_j + O(\Delta x^4) \end{aligned} \quad (6)$$

其中采用了许多算子记号

$$\begin{aligned} E^\theta u_j &= u_{j+\theta}, \quad \mu = \frac{1}{2}(E^{1/2} + E^{-1/2}) \\ \delta &= (E^{1/2} - E^{-1/2}), \quad \delta^2 = (E^1 - 2 + E^{-1}) \\ \mu^* &= \frac{1}{2}(E^1 + E^{-1}), \quad \mu \delta = \frac{1}{2}(E^1 - E^{-1}) \end{aligned} \quad (7)$$

其实上面的有理逼近可以写作

$$\left(1 + \frac{1}{6} \delta^2 \right) u'_j = \frac{1}{\Delta x} \mu \delta u_j + O(\Delta x^4) \quad (8)$$

如果展开它就是下面的式 (16) 的第 1 式. 这也就是为什么将下面讨论的逼近方式称之为有理逼近的原因.

3.1 函数微商的有理逼近

1992年, Lele^[5] 在 JCP 上发表了一篇构造有理逼近高阶差分方法的著名论文. 其思想是建立离散节点上的函数值, 与其节点上的各阶微商值的关系

$$\begin{aligned} BD &= \frac{1}{\Delta x} Cf, \\ D &= (f_1^{(k)}, \dots, f_i^{(k)}, \dots, f_N^{(k)})^T \\ f &= (f_1, \dots, f_i, \dots, f_N)^T \end{aligned} \quad (9)$$

其中 $k = 1, 2, 3$ 表示微商的阶次. 利用这种关系得到高精度空间导数值的逼近, 从而避开了 Riemann 问题思想的一统天下. 这对于对流 - 扩散, 甚至色散等阶方程问题, 指出了数值方法的小节点模板的设计思想, 开拓了 CFD 方法的新方向.

Lele 的著名论文已经讨论了 $k = 1, 2, 3$ 的情况, 并且得到了直至 10 阶精度的逼近公式. 它们分别是

$$\begin{aligned} f'_i + \alpha(f'_{i+1} + f'_{i-1}) + \beta(f'_{i+2} + f'_{i-2}) &= \\ a \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} + b \frac{f_{i+2} - f_{i-2}}{4\Delta x} + c \frac{f_{i+3} - f_{i-3}}{6\Delta x} & \\ a + 2^m b + 3^m c = 2 \frac{(m+1)!}{m!} (\alpha + 2^m \beta) & \\ O(\Delta x^{(m+2)}) & \end{aligned} \quad (10)$$

可以看到上式的左、右两端都是 5 节点的模板. 其中第 2 式是左、右两端待定系数的关系和可能达到的逼近截断误差. 根据需要, 可以简化待定系数的设定, 得到更方便的逼近形式. 例如取左端 3 节点, 右端 5 节点模板的情况, 即 $c = \beta = 0$ 时, 我们有 $m = 2, 4$ 两种形式

$$\begin{aligned} c = \beta = 0, a = \frac{2}{3}(\alpha + 2), b = \frac{1}{3}(4\alpha - 1) & \\ R \doteq \frac{4}{5!}(3\alpha - 1)\Delta x^4 f^{(5)} & \\ c = \beta = 0, \alpha = \frac{1}{3}, a = \frac{14}{9}, b = \frac{1}{9} & \\ R \doteq \frac{4}{7!}\Delta x^6 f^{(7)} & \end{aligned} \quad (11)$$

特别地, 如果上式取 $b = 0$, 有最小的右端模板, 即

$$\begin{aligned} c = \beta = 0, \alpha = \frac{1}{4}, a = \frac{3}{2}, b = 0 & \\ \frac{1}{4}f'_{i-1} + f'_i + \frac{1}{4}f'_{i+1} = \frac{3}{2\Delta x}\mu\delta f_i & \end{aligned}$$

可以采用算子的配方整理得

$$\begin{aligned} \frac{1}{4}(Ef'_i + E^{-1}f'_i - 2f'_i) + \left(1 + \frac{2}{4}\right)f'_i &= \frac{3}{2\Delta x}\mu\delta f_i \\ \frac{3}{2}\left(\frac{\delta^2}{6} + 1\right)f'_i &= \frac{3}{2\Delta x}\mu\delta f_i \\ f'_i &= \frac{1}{\Delta x} \frac{\mu\delta}{(1 + \delta^2/6)} f_i \end{aligned} \quad (12)$$

对于 2 阶导数也有

$$\begin{aligned} f''_i + \alpha(f''_{i+1} + f''_{i-1}) + \beta(f''_{i+2} + f''_{i-2}) &= \\ a \frac{\delta^2 f_i}{\Delta x^2} + b \frac{f_{i+2} - 2f_i + f_{i-2}}{4\Delta x^2} + c \frac{f_{i+3} - 2f_i + f_{i-3}}{9\Delta x^2} & \\ a + 2^m b + 3^m c = 2 \frac{(m+2)!}{m!} (\alpha + 2^m \beta) & \\ O(\Delta x^{(m+2)}) & \end{aligned} \quad (13)$$

同样地可以简化节点模板的设定, 得到方便适中的逼近形式. 例如取左端 3 节点, 右端 5 节点模板的情况, 即 $c = \beta = 0$ 时, 我们有 $m = 2, 4$ 两种形式

$$\begin{aligned} c = \beta = 0, a = \frac{4}{3}(1 - \alpha), b = \frac{1}{3}(10\alpha - 1) & \\ R \doteq -\frac{4}{6!}(11\alpha - 2)\Delta x^4 f^{(6)} & \\ c = \beta = 0, \alpha = \frac{2}{11}, a = \frac{12}{11}, b = \frac{2}{11} & \\ R \doteq -\frac{8 \times 4}{11 \times 8!}\Delta x^6 f^{(8)} & \end{aligned} \quad (14)$$

但是, 对于 3 阶微商的情况, 特别是右端, 就不应该仍然取 3 个待定系数 a, b, c 形式. 因为那样作, 右端的节点模板就太大了. 这将给边界的处理带来更大的困难. 所以通常是取

$$\begin{aligned} f'''_i + \alpha(f'''_{i+1} + f'''_{i-1}) &= \\ a \frac{f_{i+2} - 2f_{i+1} + 2f_{i-1} - f_{i-2}}{2\Delta x^3} + & \\ b \frac{f_{i+3} - 3f_{i+1} + 3f_{i-1} - f_{i-3}}{8\Delta x^3} & \\ a = 2, b = 2\alpha - 1, R \doteq \frac{12}{7!}(16\alpha - 7)\Delta x^4 f^{(7)} & \\ \alpha = \frac{7}{16}, a = 2, b = -\frac{1}{8}, R \doteq \frac{36}{9!}\Delta x^6 f^{(9)} & \end{aligned} \quad (15)$$

Hixon 等人^[6] 提出了另一种加权形式的微商值与函数值的关系, 称为 High-order accuracy MacCormark-Type 格式. 这种形式使矩阵 D 有显

然的对角优势. 显然有

$$\begin{aligned} \frac{1}{6}(f'_{i-1} + 4f'_i + f'_{i+1}) &= \frac{1}{\Delta x} \mu \delta f_i + O(\Delta x^4) \\ \frac{1}{5}(f'_{i-1} + 3f'_i + f'_{i+1}) &= \frac{1}{\Delta x} \left[\frac{7}{15}(f_{i+1} - f_{i-1}) + \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{60}(f_{i+2} - f_{i-2}) \right] + O(\Delta x^6) \end{aligned} \quad (16)$$

并且构造了基于前差和后差算子的高精度 MacCormack 型格式.

3.2 边界逼近问题

高阶的有理逼近方法, 要实现式 (9) 简单求解, B 矩阵最好是三、五对角的形式. 于是要求在边界附近的微商也应当适应三、五对角系数矩阵的状态. 对此, Lele 的论文已经给出了几种精度的逼近格式. 其中, 对 1 阶微商

$$\begin{aligned} f'_1 + \alpha f'_2 &= \frac{1}{\Delta x} (af_1 + bf_2 + cf_3 + df_4) \\ a &= -\frac{11+2\alpha}{6}, b = \frac{6-\alpha}{2}, c = \frac{2\alpha-3}{2} \\ d &= \frac{2-\alpha}{6}; O(\Delta x^3) \\ \alpha &= 3, a = -\frac{17}{6}, b = \frac{3}{2}, c = \frac{3}{2}, d = -\frac{1}{6} \\ &O(\Delta x^4) \end{aligned} \quad (17)$$

对 2 阶微商

$$\begin{aligned} f''_1 + \alpha f''_2 &= \frac{1}{\Delta x^2} (af_1 + bf_2 + cf_3 + df_4 + ef_5) \\ a &= \frac{11\alpha+35}{12}, b = -\frac{5\alpha+26}{3}, c = \frac{\alpha+19}{2} \\ d &= \frac{\alpha-14}{3}, e = \frac{11-\alpha}{12} \\ R &\doteq \frac{\alpha-10}{12} \Delta x^3 f^{(5)} \end{aligned} \quad (18)$$

也有左端为单节点逼近形式

$$\begin{aligned} f''_1 &= \frac{1}{\Delta x^2} (2f_1 - 5f_2 + 4f_3 - f_4), R \doteq \frac{11}{12} \Delta x^2 f^{(4)} \\ f''_1 &= \frac{1}{\Delta x^2} \left(\frac{35}{12} f_1 - \frac{26}{3} f_2 + \frac{19}{2} f_3 - \frac{14}{3} f_4 + \frac{11}{12} f_5 \right) \\ R &\doteq \frac{5}{6} \Delta x^3 f^{(5)} \end{aligned} \quad (19)$$

类似地, 可以采用反对称给出右边界的条件.

3.3 紧致 (compact) 格式的构成

现在, 我们已经可以利用前面的有理逼近设计紧致方法了. 譬如简单的 Burgers 方程

$$u_t + \left(\frac{u^2}{2} \right)_x = \nu u_{xx} \quad (20)$$

其半离散方法可以是

$$\frac{du_i}{dt} = -f'_i + \nu u''_i, f_i = \frac{u_i^2}{2} \quad (21)$$

或者

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{U}}{dt} &= -\mathbf{F}' + \nu \mathbf{U}''', \mathbf{U} = (u_1, \dots, u_N)^T \\ \mathbf{F} &= \frac{1}{2}(u_1^2, \dots, u_N^2)^T \end{aligned} \quad (22)$$

利用式 (11) 和式 (12), 我们可以生成

$$\mathbf{B}_1 \mathbf{F}' = \mathbf{C}_1 \mathbf{F}; \mathbf{B}_2 \mathbf{U}'' = \mathbf{C}_2 \mathbf{U} \quad (23)$$

这里矩阵 $\mathbf{C}_1, \mathbf{C}_2$ 是非三、五对角的形式, $\mathbf{B}_1, \mathbf{B}_2$ 也因为第 1 和最后一行的原因而减弱了对角优势. 其逆可求, 从而半离散格式可以得到

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{U}}{dt} &= -\mathbf{B}_1^{-1} \mathbf{C}_1 \mathbf{F} + \nu \mathbf{B}_2^{-1} \mathbf{C}_2 \mathbf{U} \\ \mathbf{U}(0) &= \mathbf{U}^0 \end{aligned} \quad (24)$$

当然, 如果能够得到统一的 B 矩阵, 上式可以

$$\mathbf{B} \frac{d\mathbf{U}}{dt} = -\mathbf{C}_1 \mathbf{F} + \nu \mathbf{C}_2 \mathbf{U} \quad (25)$$

3.4 整格点函数值与半格点函数值的转换

在积分平均和数值通量型的方法中 (见专著 [3]) 常常需要通过平均量, 也就是整格点函数值, 来构造或者重构网格交界处, 即半格点上的函数值和微商值. 在该书前面的许多节里, 给出了各种构造方法. 上述有理逼近的方式也同样可以达到这个目的.

虽然在 Lele 的论文中也有所涉及, 但是那里的中点插值方法并不适用于我们现在的情况. Deng 和 Zhang 的论文 [7], 及 Kobayashi 的论文 [8] (论文的格式表中有错误) 和 Lacor 等人的论文 [9] 中, 给出了比较多的讨论. 其中, 函数微商关系有

$$\begin{aligned} f'_i + \alpha(f'_{i+1} + f'_{i-1}) &= \\ & a \frac{f_{i+1/2} - f_{i-1/2}}{\Delta x} + b \frac{f_{i+3/2} - f_{i-3/2}}{3\Delta x} \\ a &= \frac{3}{8}(3-2\alpha), b = \frac{1}{8}(22\alpha-1) \\ R &= \frac{9-62\alpha}{1920} \Delta x^4 f^{(5)} \\ \alpha &= \frac{1}{22}, f'_i + \frac{1}{22}(f'_{i+1} + f'_{i-1}) = \frac{24}{22} \frac{f_{i+1/2} - f_{i-1/2}}{\Delta x} \\ \alpha &= \frac{9}{62}, f'_i + \frac{9}{62}(f'_{i+1} + f'_{i-1}) = \\ & \frac{63}{62} \frac{f_{i+1/2} - f_{i-1/2}}{\Delta x} + \frac{17}{62} \frac{f_{i+3/2} - f_{i-3/2}}{3\Delta x}, O(\Delta x^5) \\ \alpha &= 0, f'_i = \frac{9}{8} \frac{f_{i+1/2} - f_{i-1/2}}{\Delta x} - \frac{1}{8} \frac{f_{i+3/2} - f_{i-3/2}}{3\Delta x} \end{aligned} \quad (26)$$

注意最后 $\alpha = 0$ 的情况, 是显式, 很有用处. 如果要求左端模板是半格点, 右端是整格点, 可以利用上述公式的平移得到.

半格点与整格点上函数值的转换也容易得到

$$\begin{aligned} u_{i+1/2} + \alpha(u_{i+3/2} + u_{i-1/2}) &= \\ \frac{10\alpha + 9}{16}(u_{i+1} + u_i) + \frac{6\alpha - 1}{16}(u_{i+2} + u_{i-1}) & \\ u_{1/2} &= \frac{1}{16}(35u_1 - 35u_2 + 21u_3 - 5u_4) \\ u_{3/2} &= \frac{1}{16}(5u_1 + 15u_2 - 5u_3 + u_4) \end{aligned} \quad (27)$$

这里当 $\alpha = \frac{3}{10}$ 时, 上式中的基本公式达到 6 阶精度. 至于右边界完全可以用反对称得到.

另一方面, 我们也会需要由整格点上的函数值来求出半格点上的函数值, 或者反之, 由半格点函数值求出整格点的函数值. 譬如

$$\begin{aligned} \frac{1}{4}u_{i-1/2} + u_{i+1/2} + \frac{1}{4}u_{i+3/2} &= \frac{3}{4}(u_i + u_{i+1}) \\ \frac{1}{6}u_{i-1/2} + u_{i+1/2} + \frac{1}{6}u_{i+3/2} &= \frac{2}{3}(u_i + u_{i+1}) \\ f_{i+1/2} &= \frac{7}{12}(f_i + f_{i+1}) - \frac{1}{12}(f_{i-1} + f_{i+2}) \end{aligned}$$

(见文献 [9]). Deng 等^[7] 特别采用了

$$f_{i+1/2} = \frac{1}{2}(f_i + f_{i+1}) + \frac{1}{6}(\tilde{\delta}f_{i-1} - \tilde{\delta}f_i)$$

$$\tilde{\delta}f_i = \begin{cases} \min(|\mu\delta f_i|, \alpha_1|f_{i+1} - f_i|, \alpha_2|f_i - f_{i-1}|) \cdot \\ \quad \text{sgn}(\delta f_i), \text{ 若 } \Delta f_i \cdot \nabla f_i > 0 \\ 0, \quad \text{否则} \end{cases}$$

4 小模板的 Padé 逼近格式及其应用

众所周知, 为了线性逼近一个函数的 m 阶微商, 并且要求达到 k 阶的逼近精度, 所需要的差分节点数至少是微商阶与精度阶之和. 即所需模板大小为 $m + k$. 但是利用有理 Padé 型逼近有可能大为减小节点模板, 而且可以避免振荡机制.

利用上述的讨论和许多公式, 我们可以建立小模板的 Padé 高阶精度格式. 特别是对于非线性发展方程的数值模拟, 更有很大的优越性.

高阶非线性发展方程有着广泛而深刻的物理背景和现实意义. 对它的数值解和模拟的困难, 主要在于方程含有高阶微商, 同时它们对于数值方法的数值余项效应, 即数值耗散、色散效应又非常的敏感. 像 Burgers, KdV, RLW, Schrodinger, Boussinesq 方程. 特别是二元方程, 譬如

Boussinesq:

$$\begin{aligned} \eta_t + u_x + (\eta u)_x &= 0 \\ u_t + \eta_x + uu_x - \frac{1}{3}u_{xxt} &= 0 \end{aligned} \quad (28)$$

KdV-KdV:

$$\begin{aligned} \eta_t + u_x + (\eta u)_x + \frac{1}{6}u_{xxx} &= 0 \\ u_t + \eta_x + uu_x - \frac{1}{3}\eta_{xxx} &= 0 \end{aligned} \quad (29)$$

Bidirection KdV:

$$\begin{aligned} \xi_t + u_x + [(1 + \xi)u]_x &= -\frac{1}{3}u_{xxx} \\ u_t + uu_x + \xi_x &= 0 \end{aligned} \quad (30)$$

等等. 要在数值模拟中保持其波形的物理形态和守恒特征等, 相当困难. 多项式型插值的数值方法, 由于它的内在振荡机制, 常常不容易得到满意的模拟结果. 我们采用了 Padé 型小模板方法所进行的数值模拟, 却很成功.

根据式 (10)~ 式 (15), 我们可以将 1 阶、2 阶、3 阶的微商关系系统一起来考虑. 首先保证左端的 3 节点模板完全统一, 右端的模板仅仅取两个差商形式.

先考察 Burgers 方程, 令

$$\begin{aligned} f'_i + \alpha(f'_{i+1} + f'_{i-1}) &= \\ a \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} + b \frac{f_{i+2} - f_{i-2}}{4\Delta x} & \\ f''_i + \alpha(f''_{i+1} + f''_{i-1}) &= \\ \bar{a} \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta x^2} + \bar{b} \frac{f_{i+2} - 2f_i + f_{i-2}}{4\Delta x^2} & \\ f'''_i + \alpha(f'''_{i+1} + f'''_{i-1}) &= \\ \hat{a} \frac{f_{i+2} - 2f_{i+1} + 2f_{i-1} - f_{i-2}}{2\Delta x^3} + \\ \hat{b} \frac{f_{i+3} - 3f_{i+1} + 3f_{i-1} - f_{i-3}}{8\Delta x^3} & \end{aligned} \quad (31)$$

这需式 (31) 第 1、第 2 式的微商. 只考虑 4 阶精度形式, 我们可以导出以下系数关系

$$\begin{aligned} a &= \frac{2}{3}(\alpha + 2), \quad b = \frac{1}{3}(4\alpha - 1) \\ \bar{a} &= \frac{4}{3}(1 - \alpha), \quad \bar{b} = \frac{1}{3}(10\alpha - 1) \end{aligned} \quad (32)$$

为得到 Padé 逼近, 保持左端的模板不变. 对右边有两种选择:

$$(1) \quad b = 0: \quad \alpha = \frac{1}{4}, \quad a = \frac{3}{2}, \quad \bar{a} = 1, \quad \bar{b} = \frac{1}{2}.$$

代入式 (31) 第 1 式, 经过配方整理, 得 1 阶、2 阶微商 Padé 逼近

$$\begin{aligned} u'_i &= \frac{1}{\Delta x} \frac{\mu\delta}{1 + \frac{1}{6}\delta^2} u_i + O(\Delta x^4) \\ u''_i &= \frac{1}{\Delta x^2} \frac{\frac{1}{3}(\mu\delta)^2 + \frac{2}{3}\delta^2}{1 + \frac{1}{6}\delta^2} u_i + O(\Delta x^4) \end{aligned} \quad (33)$$

(2) $\bar{b} = 0$: $\alpha = \frac{1}{10}$, $a = \frac{7}{5}$, $b = -\frac{1}{5}$, $\bar{a} = \frac{6}{5}$. 有另一种 Padé 格式

$$\begin{aligned} u'_i &= \frac{1}{\Delta x} \frac{\frac{7}{6}\delta^2 - \frac{1}{6}(\mu\delta)^2}{1 + \frac{1}{12}\delta^2} u_i + O(\Delta x^4) \\ u''_i &= \frac{1}{\Delta x^2} \frac{\delta^2}{1 + \frac{1}{12}\delta^2} u_i + O(\Delta x^4) \end{aligned} \quad (34)$$

其中算子符号见式 (7).

因为只有采用统一的分母算子多项式, 才能够最大限度地减小模板. 取式 (33), 有

$$\begin{aligned} (1 + \frac{1}{6}\delta^2)(u_t)_i &= -\frac{1}{\Delta x} \mu\delta \left(\frac{u_i^2}{2}\right) + \\ &\quad \frac{\nu}{\Delta x^2} \left(\frac{1}{3}(\mu\delta)^2 + \frac{2}{3}\delta^2\right) u_i \end{aligned} \quad (35)$$

与边界条件和初值条件结合, 可得三对角阵的常微分方程组. 然后, 采用 Runge-Kutta 方法求解. 在这里我们特别介绍一种全离散的 “ Δ -Type” 方法. 记

$$\begin{aligned} v_i &= u_i^{n+1} - u_i^n \\ (u_t)_i &= \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \frac{v_i}{\Delta t} \end{aligned} \quad (36)$$

则可以进行下面的两步计算过程

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{1}{6}\delta^2\right)v_i &= -\frac{\Delta t}{\Delta x} \mu\delta \left(\frac{u_i^2}{2}\right)^{n+1/2} + \\ &\quad \frac{\nu\Delta t}{\Delta x^2} \left(\frac{1}{3}(\mu\delta)^2 + \frac{2}{3}\delta^2\right) u_i^{n+1/2} \\ u_i^{n+1} &= u_i^n + v_i \end{aligned} \quad (37)$$

其中

$$\begin{aligned} \left(\frac{u_i^2}{2}\right)^{n+1/2} &= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{u_i^2}{2}\right)^{n+1} + \left(\frac{u_i^2}{2}\right)^n \right] \\ u_i^{n+1/2} &= \frac{1}{2}(u_i^{n+1} + u_i^n) \end{aligned} \quad (38)$$

并且需要进行预估 - 校正迭代一二次.

对于 KdV 方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + 3\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u^2}{2}\right) + \mu\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0$$

只需式 (31) 第 1、第 3 式的微商关系. 如果只要求 4 阶精度, 我们也有

$$\begin{aligned} a &= \frac{2}{3}(\alpha + 2), \quad b = \frac{1}{3}(4\alpha - 1) \\ \hat{a} &= 2, \quad \hat{b} = 2\alpha - 1 \end{aligned} \quad (39)$$

为了简便取 $\hat{b} = 0$, 即 $\alpha = \frac{1}{2}$, 这时有 Padé 逼近公式

$$\begin{aligned} u'_i &= \frac{1}{\Delta x} \frac{\frac{1}{6}\mu\delta^3 + 2\mu\delta}{2 + \frac{1}{2}\delta^2} u_i + O(\Delta x^4) \\ u''_i &= \frac{1}{\Delta x^2} \frac{2\mu\delta^3}{2 + \frac{1}{2}\delta^2} u_i + O(\Delta x^4) \end{aligned} \quad (40)$$

如果是 KdV- Burgers 方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + 3\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u^2}{2}\right) + \mu\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = \nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

则需式 (31) 全部微商关系. 只要求 4 阶精度, 我们也有

$$\begin{aligned} a &= \frac{2}{3}(\alpha + 2), \quad b = \frac{1}{3}(4\alpha - 1) \\ \bar{a} &= \frac{4}{3}(1 - \alpha), \quad \bar{b} = \frac{1}{3}(10\alpha - 1) \\ \hat{a} &= 2, \quad \hat{b} = 2\alpha - 1 \end{aligned} \quad (41)$$

同样, 为了简便取 $\hat{b} = 0$, 即 $\alpha = \frac{1}{2}$, 这时有 Padé 逼近公式

$$\begin{aligned} u'_i &= \frac{1}{\Delta x} \frac{\frac{5}{6}\mu^*\mu\delta + \frac{5}{6}\mu\delta}{1 + \frac{1}{4}\delta^2} u_i + O(\Delta x^4) \\ u''_i &= \frac{1}{\Delta x^2} \frac{\frac{2}{3}(\mu\delta)^2 + \frac{1}{3}\delta^2}{1 + \frac{1}{4}\delta^2} u_i + O(\Delta x^4) \\ u'''_i &= \frac{1}{\Delta x^3} \frac{\mu\delta^3}{1 + \frac{1}{4}\delta^2} u_i + O(\Delta x^4) \end{aligned} \quad (42)$$

我们利用上述的 Padé 公式, 构造了 Burgers, KdV, KdV-Burgers, Bidirection-KdV 方程的小模板格式, 得到很好的孤波的模拟图像 (见 Liu 等^[10], Xu 等^[11,12], 融华等^[13] 的多篇论文). 特别是后者的双向孤立子的数值模拟, 是迄今少见的好结果 (见图 2, 图 3).

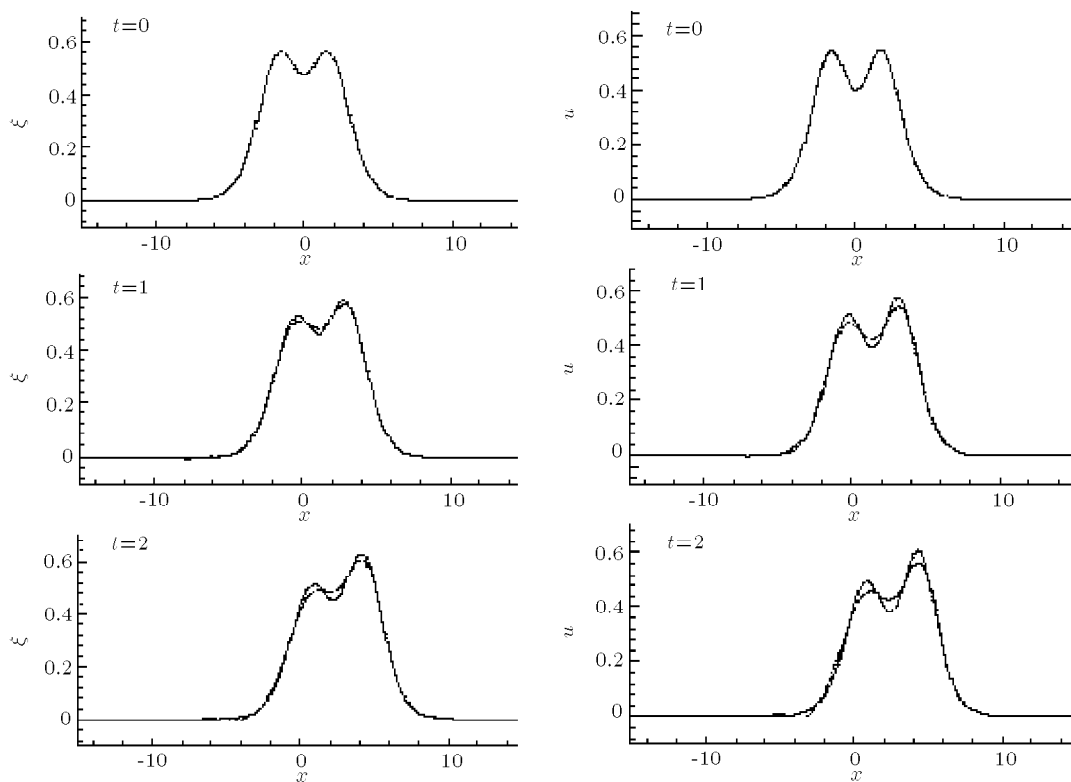


图 2 Bidirection-KdV 方程的双向孤波数值实验
左为 ξ 波, 右为 u 波形, 实线为真解

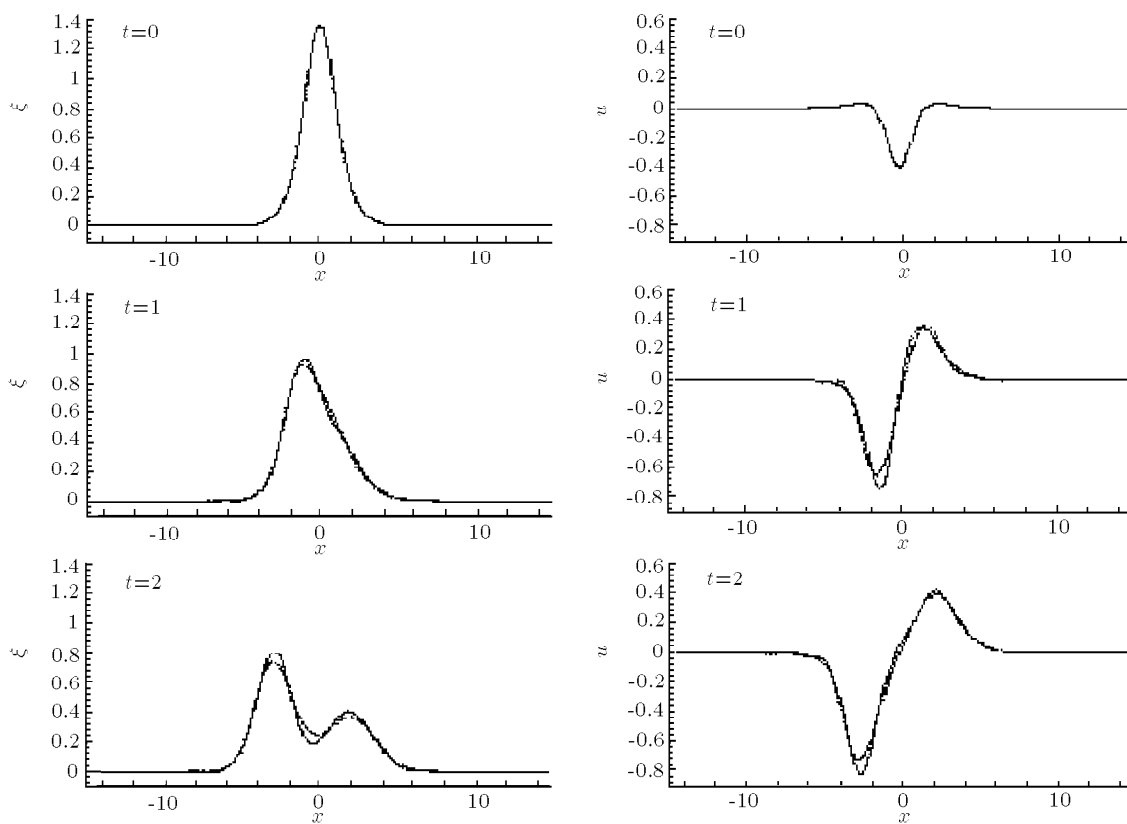


图 3 Bidirection-KdV 方程的同向孤波数值实验
左为 ξ 波, 右为 u 波形, 实线为真解

5 有理逼近紧致方法的进展和应用

其实,早在 20 世纪的 60 年代,有理和 Padé 逼近的思想和公式,就已经出现在一些专著中了,例如 Kopal 的数值分析^[14], Collatz 的偏微分方程的数值方法^[15]. 而且在 70 年代已经有了具体的 CFD 方法和实际应用,譬如 1975 年 Hirsh 将紧致方法应用到力学问题的计算^[4]. 80 年代以后, Goedheer 等人对非等距网格的讨论^[16], Abarbanel 和 Kumar 在 Euler 方程数值计算上的应用^[17], 等等. 但是,并没有引起广泛地关注.

自从 20 世纪 90 年代以来,有理逼近方法或者紧致(compact)型方法,特别是 Padé 型方法得到极大的重视和迅速的发展. 其中, Lele 的著名论文实在起到不可估量的作用.

综观这方法的发展和应用,可以初步的归纳为以下几个方面:

(1) 小模板 Padé 型方法的研究和应用

这是有理逼近方法的一个优势所在. 其中以 Hixon 和 Turkel 的工作为代表^[6,18]. 以及我们的一系列工作. Hixon 的工作,是组合了前差分和后差分算子,提出一套逼近格式. 利用这些格式他们对激波管问题、二维柱坐标下的声散射问题进行了数值实验,得到非常好的结果.

(2) Compact 型有限体积方法研究和应用

这方面的工作应该说很有成果. Kobayashi 的 Padé 有限体积方法^[8],尽管有的公式错的可惜,但是该文进行了全面的推导、讨论和理论分析,是一篇非常重要的论文.

Piller 等人^[19]的论文针对不可压 Navier-Stokes 问题,提出了非一致网格配点即 Staggered 网格的二维 N-S 方程的 Compact 格式. 这种网格配置,给各阶微商的有理逼近带来很大难度. 例如连续性方程

$$\operatorname{div}(\mathbf{v}) = 0 \quad (43)$$

在控制元 $c = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] \times [y_{j-1/2}, y_{j+1/2}]$ 上积分得

$$\int_c \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} ds = 0, \text{ 或 } (\bar{u}_{i+1/2}^y - \bar{u}_{i-1/2}^y) \Delta y + (\bar{v}_{j+1/2}^x - \bar{v}_{j-1/2}^x) \Delta x = 0 \quad (44)$$

$$\bar{u}_{i+1/2}^y \triangleq \frac{1}{\Delta y} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} u(x_{i+1/2}, y) dy$$

为了构造 Padé 逼近,采用如下待定系数形式

$$\begin{aligned} \bar{u}_{i+1/2}^y + \alpha(\bar{u}_{i-1/2}^y + \bar{u}_{i+3/2}^y) &= a \frac{\mu \delta}{2 \Delta x} \bar{u}_{i+1/2}^{xy} \\ \bar{u}_i^{xy} \triangleq \frac{1}{\Delta x \Delta y} \int_{-\Delta x/2}^{\Delta x/2} \int_{-\Delta y/2}^{\Delta y/2} & u(x_{i+1/2} + \xi, y_j + \eta) d\xi d\eta \end{aligned} \quad (45)$$

尤其困难的是动量方程的对流和黏性项的推导. 论文的思想和方法比较复杂和烦琐.

Lacor 等人^[9]更进一步提出了任意结构网格上的 Compact central FVM 的论文. 相比前面的论文,这里不采用 Staggered 型配置,使方法可行、方便. 采用所提的方法,他们计算了一致和非一致剖分网格的 2D Gaussian 波, 2D 平板层流和亚音速涡流,并进行了大涡模拟实验.

Piller 等的论文^[19]特别对结构网格上的 Staggered 格点配置,提出了极为实用的 Compact 有限体积方案. 论文可以说是迄今为止非常详尽的 Compact FVM 论文,有很详细的推证、公式、图表和讨论. 最后,给出了 2D 方腔流和有热效应的矩形腔流的数值实验. 论文的思想和方法比较简洁,容易理解和实施. 最后还给出了相当全面的有关参考文献,对愿意进行 Compact 方法研究的读者,很有价值.

(3) Compact 和 Padé 型的 ENO 和 Weighted ENO 方法

2002 年出现了两篇将 Padé 和 Compact 方法与 ENO, WENO 相结合的论文,发表在 JCP 上的 ENO-Type (Wang 等^[20]) 和守恒的 Compact-WENO 方法 (Pirozzoli^[21]).

前者提出对于守恒律方程直接采用 Padé 逼近,即

$$\begin{aligned} \frac{du_i}{dt} &= -\frac{1}{\Delta x} f'_i \\ \frac{9}{62} f'_{i-1} + f'_i + \frac{9}{62} f'_{i+1} &= \\ \frac{63}{62} \frac{f_{i+1/2} - f_{i-1/2}}{\Delta x} + \frac{17}{62} \frac{f_{i+3/2} - f_{i-3/2}}{3\Delta x} & \\ R &\doteq \frac{61}{277760} \Delta x^6 f^{(7)} \end{aligned} \quad (46)$$

边界采用的仅仅是 3 阶精度的形式

$$\begin{aligned} f'_1 - f'_2 &= \\ \frac{1}{\Delta x} (-f_{1/2} + 2f_{3/2} - f_{5/2}) - f'_{N-1} + f'_N &= \\ \frac{1}{\Delta x} (f_{N-3/2} - 2f_{N-1/2} + f_{N+1/2}) & \end{aligned} \quad (47)$$

其中,式(47)中的所有半格点值,都是采用数值通量的构造

$$\begin{aligned} f_{i+1/2} &= \frac{1}{2} \left\{ f_{i+1/2}^L + f_{i+1/2}^R - \right. \\ & \left. \frac{a_{i+1/2}}{|a_{i+1/2}|} (f_{i+1/2}^R - f_{i+1/2}^L) \right\} \end{aligned} \quad (48)$$

而且上面的左、右临界值的计算又要求通过 ENO 的左、右 Newton 插值多项式过程得到. 论文进行了方法的误差分析, 进行了 Shock-disturbance interac-

tion 问题、2D 无黏斜激波反射问题等许多算例数值实验, 与其它方法比较有更好的图像 (见图 4).

Pirozzoli^[21] 在他的论文里也是利用了 Padé 方

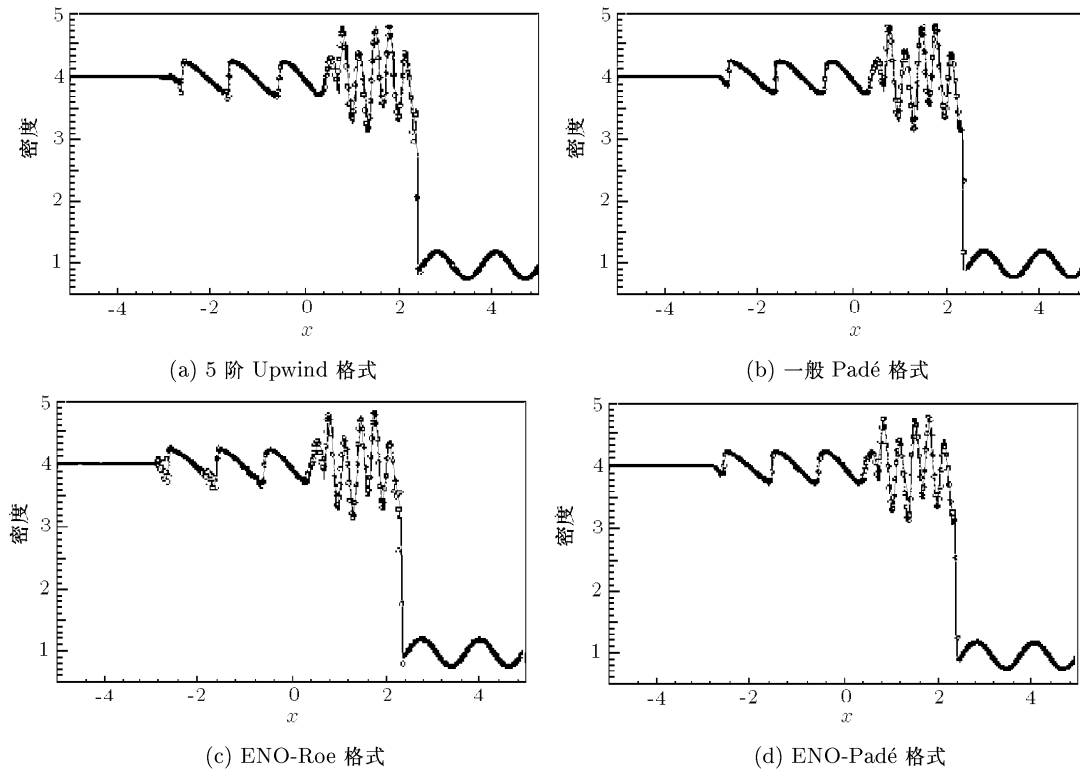


图 4 Shock/disturbance interaction 问题: $N=400, t=1.8$

法, 使 WENO 具有更好的抑制振荡的效果和达到小模板高阶精度. 论文进行了更多的算例测试, 表明有更好的应用效果.

(4) 紧致方法在湍流模拟中的应用研究

2002 年以来, Lee 等^[22] 和 Rizzetta 等^[23] 分别利用紧致方法进行湍流模拟的研究. 特别是结合大涡模拟 (large eddy simulation, LES) 中, 对高阶微商项的高精度逼近和高阶滤波方法的要求. 前者采用了两个自由选择参数的高阶紧致谱方法的计算格式. 论文都有算例和分析.

(5) 涡 - 流函数方程形式的高阶紧致格式

Tian 等^[24] 的论文对于含有传热的二维涡 - 流函数方程问题

$$\begin{aligned} \Delta\psi &= -\zeta, \quad \Delta T = \psi_y T_x - \psi_x T_y \\ \Delta\zeta &= \frac{1}{Pr}(\psi_y \zeta_x - \psi_x \zeta_y) - Ra T_x + f \end{aligned} \quad (49)$$

提出了 4 阶的紧致格式. 事实上, 即为方程共同的 Laplace 微分算子构造了 4 阶差分逼近格式. 如图 5 的编号.

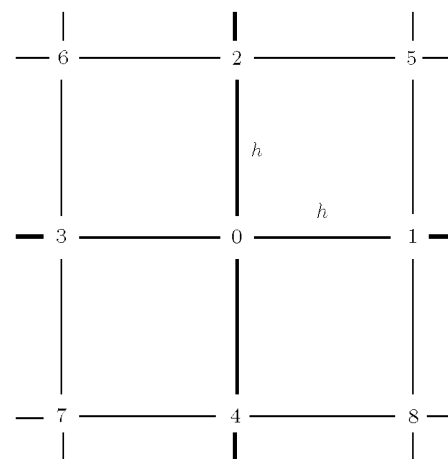


图 5 等步长正交网格的节点编号

论文给出对方程

$$\phi_{xx} + \phi_{yy} = g \quad (50)$$

的紧致逼近格式

$$\begin{aligned} \frac{1}{6h^2} \left(4 \sum_{j=1}^4 \phi_j + \sum_{j=5}^8 \phi_j - 20\phi_0 \right) = \\ \frac{1}{12} \left(8g_0 + \sum_{j=1}^4 g_j \right) \end{aligned} \quad (51)$$

其中主要采用了 2 阶微商的式 (34) Padé 逼近公式。

印度学者 Kalita 等人^[25]也在他们的论文中构造了对流 - 扩散微分算子的紧致差分逼近。更好的是他们采用的是非等距网格。讨论和分析也更加精致。他们所给出的许多涡 - 流函数的非定常算例模拟实验, 结果优良。

(6) 紧致和 Padé 方法的构造和理论分析研究

包括 Lele 在内的前面所述的许多论文, 都在设计紧致和 Padé 格式的同时也进行了方法的简单理论分析和讨论。其中对方法的误差、算子谱、波数和波形的分辨率、色散关系等进行了 Fourier 方法的分析。特别是参考文献中列出的论文 [22, 23, 26 ~ 28], 比较多着眼于方法的构造技术和理论分析。

Fourier 分析是将针对模型问题的周期边界条件进行, 令

$$f_i = e^{ikx_j}, k \text{ 为波数} \quad (52)$$

则相应的 1 阶、2 阶微商, 紧致方法数值解分别为

$$\begin{aligned} f'_j &\sim ik e^{ikx_j}, f''_j \sim -k^2 e^{ikx_j} \\ Df_j &\sim ik' e^{ikx_j}, D^2 f_j \sim -k'^2 e^{ikx_j} \end{aligned} \quad (53)$$

根据逼近格式可以得到 $k' \Delta x, k'' \Delta x$, 以及相对因子误差。通过它, 分析所谓“分辨率效应 (resolution efficiency)”。

Wilson 等人的论文^[27]是一篇难得的讨论不可压流紧致方法的作品。有详实的格式讨论, 也有具体的实施方案。Deng 等的论文^[7]除了列出了各种格式, 也讨论了格式的特征谱。特别难得的是给了很多的算例, 例如爆炸波问题, 前台阶问题和定常超音速黏性绕圆柱流, 等等。上述两篇文章, 提供给读者相当多的信息。这也是一篇科学论文应当具有的特点。

最近, Shukla 等^[28]提出了采用多项式插值方法构造非一致网格下的高阶紧致格式的途径。文中列出了精细的公式和图表。

Gupta 等人^[29]提出多重网格紧致型的方法。Feng 等^[30]结合了 CIP(cubic-interpolated pseudo-particle method) 方法, 改进了 Collela 的 PPM 方法, 提出了所谓的 PRM(分段有理逼近) 方法。Kechroud 等人^[31]最近提出了 Padé 型的无反射边界的研究论文。Erturk 等^[32]提出了高雷诺数流的 4 阶紧致格式, 得到很漂亮的模拟效果。

6 结束语

“high-order compact” 方法, 或者 “Padé-Type” 方法, 由于它们的高精度、小模板和内在的弱振荡特

性, 在 20 多年来日益受到重视, 得到迅速的发展。可以期望今后将在计算流体力学方法中, 特别是在复杂流体模拟, 包括湍流数值模拟中, 有更好的应用。

如果将紧致方法的思想与许多其它成功的方法相结合, 可能开拓新的方向。例如, 将它和 CIP 方法结合, 取长补短, 能够达到优势互补, 有更好的发展空间和发展前景。譬如利用紧致方法的微商的计算方式, 就可以避免 CIP 方法中计算微商的困难。

当然, 任何一种方法都有它的适应范围和弱点。“high-order compact” 方法, 或者 “Padé-Type” 方法也是一样, 它在边界处理上 (见式 (17) ~ 式 (19)) 还不简洁、灵活; 特别是对于复杂曲线坐标网格, 以及无结构网格的处理上还存在许多难点, 尽管 Lacor 和 Piller 等人^[9,19]的论文有所讨论, 但仍不尽人意, 尚需要进一步进行研究。

参 考 文 献

- 1 忻孝康, 刘儒勋, 蒋伯诚. 计算流体力学. 长沙: 国防科技大学出版社, 1989
- 2 刘儒勋, 王志峰. 数值模拟方法和运动界面追踪. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2001
- 3 刘儒勋, 舒其望. 计算流体力学的若干新方法. 北京: 科学出版社, 2003
- 4 Hirsh R S. High order accurate solution of fluid mechanics problems by a compact differencing technique. *JCP*, 1975, 9: 90~109
- 5 Lele S K. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *JCP*, 1992, 103: 16~42
- 6 Hixon R. Prefactored small-stencil compact schemes. *J Comput. Phys*, 2000, 165: 522~541
- 7 Deng X G, Zhang H X. Developing high-order weighted compact nonlinear schemes. *JCP*, 2000, 165: 22~44
- 8 Kobayashi M H. On a class of Padé finite volume methods. *JCP*, 1999, 156: 137~180
- 9 Lacor C, Smirnov S, Baelmans M. A finite volume formulation of compact central schemes on arbitrary structured grids. *JCP*, 2004, 198: 535~566
- 10 Liu R X, Wu L L. Small-stencil Padé schemes to solve nonlinear evolution equations. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2005, 26(7): 872~881
- 11 Xu Z L, Liu R X. Numerical simulation for solitary waves of RLW equation. *J Hydrodynamics*, 2004, Ser.B, 16(2): 130~135
- 12 Xu Z L, Liu R X. A high-order Padé scheme of Korteweg-de Vries equation. *J Hydrodynamics*, 2005, Ser.B, 17(6): 654~659
- 13 融华, 刘儒勋. 双向孤立波问题的数值方法研究. 中国科技大学学报, 2004, 34(3): 295~306
- 14 Kopal Z. Numerical Analysis. New York: Wiley, 1961
- 15 Collatz L. Numerical Treatment of Differential Equations. New York: Springer-Verlag, 1966
- 16 Goedheer W J, Potters J H H M. A compact finite difference scheme on a non-equidistant mesh. *JCP*, 1985, 61: 269~279
- 17 Abarbanel S, Kumar A. Compact high-order schemes for the Euler equation. *J Scientific Computing*, 1988, 3: 275~288
- 18 Hixon R, Turkel E. Compact implicit MacCormack-Type schemes with high order. *J Comput Phys*, 2000, 158: 52~70

- 19 Piller M, Stalio E. Finite-volume compact schemes on staggered grids. *J Comput Phys*, 2004, 197: 299~340
- 20 Wang Z P, Huang G P. An essentially nonoscillatory high-order Padé-Type (ENO-Type) schemes. *J Comput Phys*, 2002, 177: 37~58
- 21 Pirozzoli S. Conservative hybrid compact-WENO schemes for shock-turbulence interaction. *J Comput Phys*, 2002, 178: 81~117
- 22 Lee Q H, Seo Y C. A new compact spectral scheme for turbulence simulation. *J Comput Phys*, 2002, 183: 438~469
- 23 Rizzetta D P. A time-implicit high-order compact differencing and filtering scheme for large-eddy simulation. *Inter J Numer Methods in Fluids*, 2002, 42: 665~693
- 24 Tian Z F, Ge Y B. A fourth-order compact finite difference scheme for the steady stream-vorticity formulation of the Navier-Stokes/Boussinesq equations. *Inter J Numer Methods in Fluids*, 2003, 41: 495~518
- 25 Kalita J C, Dalal D C, Dass A K. A class of high order compact schemes for the unsteady two-dimensional convection-diffusion equation with variable convection coefficients. *Inter J Numer Methods in Fluids*, 2002, 38: 1111~1131
- 26 Mahesh K. A family of high order finite difference schemes with good spectral resolution. *J Comput Phys*, 1998, 145: 332~358
- 27 Wilson R V, Demuren A O. High-order compact schemes for numerical simulation of incompressible flows. NASA/CR-1998-206922, ICASE Report No.98-13, 1998
- 28 Shukla R K, Zhong X L. Derivation of high-order compact finite difference schemes for non-uniform grid using polynomial interpolation. *J Comput Phys*, 2005, 204: 404~429
- 29 Gupta M M, Kouatchou J, Zhang J. A compact multigrid solver for convection-diffusion equations. *J Comput Phys*, 1997, 132: 123~129
- 30 Xiao F, Peng X D. A convexity preserving scheme for conservative advection transport. *J Comput Phys*, 2004, 198: 389~402
- 31 Kechroud R, Antoine X, Soulaïmani A. Numerical accuracy of a Padé-type non-reflecting boundary Condition for the finite element solution of acoustic scattering problems at high-frequency. *Inter J Numer Methods in Engineering*, 2005, 64: 1275~1302
- 32 Erturk E, Gokcol C. Fourth-order compact formulation of Navier-Stokes equations and Driven cavity flow at high Reynolds number. *Inter J Numer Methods in Fluids*, 2006, 50(4): 421~436

HIGH-ORDER COMPACT-TYPE SCHEMES WITH RATIONAL AND PADÉ APPROXIMATION APPROACHES *

LIU Ruxun^{1,†} LIU Xiaoping²

¹Dept of Math, The University of Sci & Tech of China, Hefei 230026, China

²State Key Laboratory of Fire Science, The University of Sci & Tech of China, Hefei 230026, China

Abstract This paper contains a detailed discussion on the HOC (high order compact) method. The history of the method is reviewed, the strongpoint of the method is pointed out, the basic properties, constructions and its present state are analyzed, together with the recent development. And especially, the mathematical foundations of the HOC-type method are discussed by summing up the relationship between the HOC and the rational approximation or Padé-type approximations. Moreover, in the paper, rich information and related formulas are provided.

Keywords rational approximation, compact method, Padé approximation, CFD

* The project supported by the National Natural Science Foundation of China (10371008, 90411009) and the Science Foundation of Beijing Computational Physics Laboratory

† E-mail: liurx@ustc.edu.cn