

三对角四阶跳点紧致格式优化和初步应用

刘 晓,李一帆,李文强,王贞化

河南师范大学数学与信息科学学院,河南新乡 453007

摘要 根据修正波数应在充分大的波数范围内接近准确波数的思想,构造了优化的3对角4阶跳点紧致差分格式及插值格式。优化跳点紧致格式仍然具有4阶精度,但提高了分辨率,能够在更大的波数范围内保持群速度特性。通过实验数据表明,优化跳点紧致差分格式的分辨率可达到 0.86π ,优化紧致插值格式可达 0.63π ,可较好保持群速度的最大波数为 0.75π ,均大于标准4阶和6阶跳点紧致格式。分别用优化格式,标准4阶和6阶跳点紧致格式计算小尺度波动的性能,结果表明优化格式在模拟小尺度波动,在减小计算误差并保持群速度方面具有明显优势。

关键词 跳点网格;紧致格式;高分辨率;群速度

中图分类号 O241.6

文献标识码 A

doi 10.3981/j.issn.1000-7857.2012.16.009

An Optimized Fourth-order Staggered Tridiagonal Compact Scheme and Its Applications

LIU Xiao, LI Yifan, LI Wenqiang, WANG Zhenhua

College of Mathematics and Information Science, Henan Normal University, Xinxiang 453007, Henan Province, China

Abstract Based on the idea that the modified wavenumbers should be as close to the exact wavenumbers as possible, an optimal tridiagonal fourth-order compact difference scheme and an interpolation scheme on the staggered grid system are proposed in this paper. Although its accuracy is of the 4th order, the optimal scheme enjoys a high resolution and at the same time preserves the characteristics of the group velocity. The numerical calculations show that the maximum resolvable wavenumbers obtained with the optimal compact difference (interpolation) scheme is 0.86π (0.63π). The group velocity can be preserved for the wavenumber less than 0.75π . All these values are better than those obtained from the standard compact schemes of fourth or sixth order. Finally, the optimal scheme, the standard fourth order compact scheme and the sixth order compact schemes are employed to calculate the first derivation and the propagations of small scale waves. The results show that the optimal scheme is superior to other two schemes with respect to the reduction of errors and the preservation of the group velocity.

Keywords staggered grids; compact scheme; high resolution; group velocity

0 引言

随着计算机技术的提高和科技事业的高度发展,在实际问题的计算中对计算精度及分辨率的要求也越来越高,因此不断发展高精度高分辨率差分格式已逐渐成为数值计算方法研究热点,这对能够更准确地模拟复杂流场的流动具有十分重要的意义。

高阶精度紧致格式具有计算精度高、网格基架点少,能有效模拟描述高波数运动等优点。1992年,Lele^[1]提出广义紧致差分格式,它与传统差分格式相比,在相同的节点上具有更高的计算精度;1996年,Kim和Lee^[2]利用保色散关系DRP (Dispersion Relation Preserving)的基本思想优化了紧致差分

格式;2009年,柳占新等^[3]在Kim和Lee的基础上再次优化紧致差分格式,进一步提高了格式的计算精度和分辨率。但采用对称型模板的紧致格式,无法抑制高波数误差和寄生误差,使得在高波段或是大梯度处产生非物理振荡,而且差分格式的精度越高,数值振荡越大^[4-5]。

通常,跳点网格能够有效地消除格点振荡;另外采用跳点网格所构造的差分格式还具有不要求解Riemann问题,计算简单、工作量少、编程简便等优势^[6],因此对提高跳点网格差分格式分辨率的研究也是数值计算方法的一个重要课题。2002年,杨宽德等^[7]利用跳点网格法数值模拟了基于喷射流和Biot宏观流动耦合在一起的BISQ (Biot-Sqirt)模型高频

收稿日期:2012-04-20;修回日期:2012-05-21

基金项目:国家自然科学基金项目(41004063);河南省教育厅自然科学研究计划项目(2010B110014);河南师范大学校级青年骨干教师培养资助计划项目

作者简介:刘晓,副教授,研究方向为计算数学、大气动力学,电子信箱:xliao@spaceweather.ac.cn

极限方程, 实现了在不增加计算量和存储空间的前提下, 达到收敛速度快的效果并且有效地减弱了波场模拟中产生的伪波动和源噪声; 2003年, Nagarajan 等^[8]把 Lele 提出的一种具有谱精度并能保持高频波动谱特征的紧致差分格式推广到跳点网格中, 这有效的消除了同位网格系统下的格点振荡问题^[9]; 2011年, 李俊峰等^[10]在跳点网格下发展了 MHD(Magneto-Hydro-Dynamics)相容守恒格式, 为湍流的大涡模拟和直接数值模拟奠定了基础。

但是, 在当今科技高速发展的背景下, 实际问题计算对格式分辨率的要求越来越高, 因此构造出具有高分辨率特性的跳点紧致格式是十分必要的。此外, 数值格式的群速度是影响计算结果的另一个重要因素。低波分量数值波以与物理波很相近的速度传播, 但随着波数的增加会导致数值波与物理波偏离, 尤其是对高频波和非定常多尺度流动问题的模拟, 这种偏离现象会随波数的增加及时间的增长而加强^[11], 所以在构造高精度高分辨率跳点紧致格式时也应考虑群速度对计算结果的影响。

本文从影响数值模拟的两个重要因素——差分格式分辨率和群速度出发, 在 Nagarajan 跳点格式的基础上构造出分辨率更高并能有效减小计算误差的优化 3 对角 4 阶跳点紧致差分格式 (Optimization of fourth-order compact staggered scheme, OCS4) 及紧致插值格式 (Optimization of fourth-order compact interpolation scheme, OCI4), 模拟具有高波数特性的一阶导数和行波解问题并与标准格式计算结果进行比较, 以体现优化格式在计算精度和群速度保持方面的优势。

1 优化 3 对角 4 阶跳点紧致格式构造

1.1 优化 3 对角 4 阶跳点紧致差分格式的构造

3 对角跳点紧致差分格式^[8]:

$$\alpha f'_{i-1} + f'_i + \alpha f'_{i+1} = b \frac{f_{i+3/2} - f_{i-3/2}}{3\Delta x} + a \frac{f_{i+1/2} - f_{i-1/2}}{\Delta x} \quad (1)$$

式中, f' 为函数 f 的空间一阶导数; Δx 和 i 分别为空间步长和网格标号; α, a, b 为常数; 右端项中的 f 为半网格点处的函数值。

对式(1)进行 Fourier 分析, 得其修正波数为

$$\omega'(\omega) = \frac{2a \sin(\omega/2) + (2b/3) \sin(3\omega/2)}{1 + 2\alpha \cos \omega} \quad (2)$$

依据修正波数 $\omega'(\omega)$ 在尽可能大的波数范围接近物理波数 $\omega = k\Delta x$ 的思想, 对式(1)进行优化。这一思想曾被用于对 3 对角 4 阶紧致差分格式的优化^[12]。引入如下绝对误差准则计算度量波数区间:

$$\left| \frac{\omega' - \omega}{\pi} \right| \leq \varepsilon \quad (3)$$

在误差准则(3)下, 任何波长的波都具有同一误差限, 这可以最大限度地提高格式分辨率^[9]。

下面介绍具体的构造过程。

首先将式(1) Taylor 展开知要使 OCS4 格式的计算精度达

到 4 阶, 其系数需满足等式^[1]:

$$\alpha + b = 1 + 2\alpha \quad (4)$$

$$\frac{1}{3!} \cdot \frac{1}{2^2} (\alpha + 3^2 b) = \alpha \quad (5)$$

在式(4)、(5)中有 3 个参数, 为求解差分格式的系数, 可根据优化目的给出与波数 ω 有关的等式如下^[13]:

$$\omega'(\omega_0) = \omega_0 \quad (6)$$

这里, 波数 ω_0 是 ω' 和 ω 重合时的 ω 。

然后, 利用如下计算流程寻找 OCS4 格式的系数:

(1) 给出不同的 ω_0 求解式(4)~(6)组成的方程组, 得出不同 α, a, b 的系数组合。

(2) 将(1)中的系数组合分别代入式(2), 计算不同差分格式对应的 $\omega'(\omega)$ 。

(3) 根据式(3)计算不同差分格式的精确求解度量波数区间, 所得区间最大的系数组合即为所求。

构造 OCS4 格式的绝对误差限取 $\varepsilon = 0.01$, 通过实验得出结论: 当 $\omega_0 = 2.57$ 时, 跳点紧致差分格式的分辨率最高, 其精确求解波数区间为 $[0, 2.7018]$, 此时修正波数可达 0.86π 。OCS4 格式的系数见表 1。

表 1 跳点紧致差分格式的优化系数

Table 1 Optimized coefficients of compact staggered scheme

| 优化系数 | a | b | α |
|------|-----------|-----------|-----------|
| OCS4 | 0.9661264 | 0.4575367 | 0.2118315 |

由于 $2\alpha \leq 1$, 则 OCS4 是一个对角占优的紧致差分格式, 可以保证利用追赶法计算的稳定性。

1.2 优化 3 对角 4 阶紧致插值格式的构造

由于跳点格式涉及半网格点处的数值, 这可由 3 对角紧致插值格式给出^[8]:

$$\alpha f'_{i-1} + f'_i + \alpha f'_{i+1} = \frac{b}{2} (f_{i+3/2} + f_{i-3/2}) + \frac{a}{2} (f_{i+1/2} + f_{i-1/2}) \quad (7)$$

这里, f' 为插值数值。通过对插值格式的 Fourier 系数与原函数的 Fourier 系数进行比较, 评定插值格式的分辨能力。插值格式的准确性及其分辨特性可由传递函数 (transfer function) 描述。传递函数是插值格式 Fourier 系数与原函数 Fourier 系数的比值。理论上, 原函数 Fourier 系数在插值之后应保持不变^[9], 因此传递函数在每一个波数上的准确值都应为 1, 即 $T(\omega) = 1$ 。

令 $f(s) = e^{i\omega s}$, 将其代入式(7), 得到传递函数:

$$T(\omega) = \frac{a \cos(\omega/2) + b \cos(3\omega/2)}{1 + 2\alpha \cos \omega} \quad (8)$$

类似于 OCS4 格式, 插值格式的优化目的是使传递函数在每一个波数上的值 $T'(\omega)$ 与其准确值 1 的重合范围尽可能大。通过计算得出结论: 当 $\omega = 1.86$ 时分辨率最高, 即得出优化 3 对角 4 阶紧致插值格式 OCI4, 其精确求解波数区间为 $[0, 1.9792]$ 。OCI4 格式的系数如表 2 所示。

表 2 紧致插值函数的优化系数

Table 2 Optimized coefficients of compact interpolation scheme

| 优化系数 | a | b | α |
|------|-----------|-----------|-----------|
| OCI4 | 1.5530072 | 0.1318043 | 0.3424058 |

由表 2 可知 $2\alpha \leq 1$, OCI4 是一个对角占优的紧致插值格式, 可以用追赶法进行稳定求解。

2 理论分析及其与传统 4 阶和 6 阶跳点格式的比较

2.1 分辨率比较

2.1.1 与标准 3 对角 4 阶和 6 阶跳点紧致差分格式分辨率比较

标准 3 对角 4 阶跳点紧致差分格式^[8]SCS4 (Standard of fourth-order compact staggered difference scheme) 格式为

$$\frac{1}{22}f'_{i-1} + f'_i + \frac{1}{22}f'_{i+1} = \frac{12}{11} \frac{f_{i+1/2} - f_{i-1/2}}{\Delta x} \quad (9)$$

标准 3 对角 6 阶跳点紧致差分格式^[8]SCS6 (Standard of sixth-order compact staggered difference scheme) 格式为

$$\frac{9}{62}f'_{i-1} + f'_i + \frac{9}{62}f'_{i+1} = \frac{17}{62} \frac{f_{i+3/2} - f_{i-3/2}}{3\Delta x} + \frac{63}{62} \frac{f_{i+1/2} - f_{i-1/2}}{\Delta x} \quad (10)$$

根据式(2), 分别计算出 OCS4、SCS4 和 SCS6 3 种格式的修正波数进行比较, 如图 1 所示。其中, OCS4 格式比 SCS4 和 SCS6 格式具有更高的分辨能力。

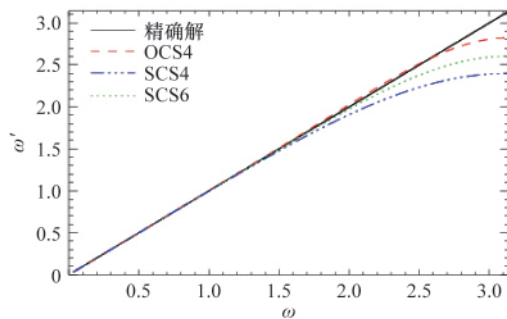


图 1 修正波数比较

Fig. 1 Comparison of modified wavenumbers of staggered differences

当 $\varepsilon=0.01$ 时, 3 种格式的精确求解区间分别为: OCS4, $[0, 2.7018]$; SCS4, $[0, 1.6336]$; SCS6, $[0, 2.0735]$, 则 3 种格式可以较好模拟的最大波数分别为 0.86π , 0.52π 和 0.66π 。

2.1.2 与标准 3 对角 4 阶和 6 阶紧致插值格式的分辨率比较

标准 3 对角 4 阶紧致插值格式^[8]SCI4 (Standard of fourth-order compact interpolation scheme) 格式为

$$\frac{1}{6}f'_{i-1} + f'_i + \frac{1}{6}f'_{i+1} = \frac{2}{3}(f_{i+1/2} + f_{i-1/2}) \quad (11)$$

标准 3 对角 6 阶紧致插值格式^[8]SCI6 (Standard of sixth-order compact interpolation scheme) 格式为

$$\frac{3}{10}f'_{i-1} + f'_i + \frac{3}{10}f'_{i+1} = \frac{1}{20}(f_{i+3/2} + f_{i-3/2}) + \frac{3}{4}(f_{i+1/2} + f_{i-1/2}) \quad (12)$$

根据式(8), 分别计算 OCI4、SCI4 和 SCI6 3 种插值格式的传递函数并进行比较, 如图 2 所示。

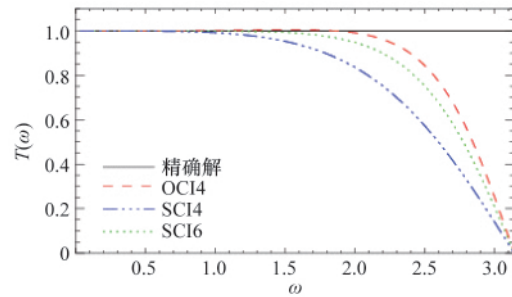


图 2 3 种插值格式传递函数分辨率的比较

Fig. 2 Comparison of transfer function of interpolation operators

当 $\varepsilon=0.005$ 时, 3 种插值格式的精确求解区间为: OCI4, $[0, 1.9792]$; SCI4, $[0, 0.9111]$; SCI6, $[0, 1.4137]$, 即 OCI4 为 $[0, 0.63\pi]$, SCI4 为 $[0, 0.29\pi]$, SCI6 为 $[0, 0.45\pi]$ 。从图 2 可以看出, OCI4 能够分辨更高的波数。

2.2 群速度比较

半离散方程的解定义群速度为^[11]

$$D(\omega) = \frac{d\omega'(\omega)}{d\omega} \quad (13)$$

根据式(2)和式(13)计算 3 种格式的群速度, 其比较如图 3 所示。

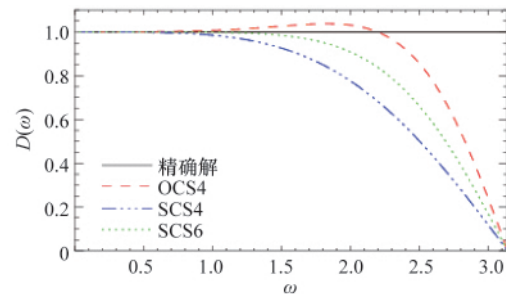


图 3 3 种格式的群速度比较

Fig. 3 Comparison of group velocity for three schemes

图 3 表明, OCS4 格式是混合格式, SCS4 格式和 SCS6 格式是慢型格式。而 3 种格式能够较好地保持群速度的波数是: OCS4 为 0.75π , SCS4 为 0.25π , SCS6 为 0.4π 。这说明, OCS4 格式较 SCS4 和 SCS6 格式能够在更大的波数范围内保持群速度不变, 尤其对于波数在 $[0.4\pi, 0.75\pi]$ 之间的波动, OCS4 格式具有更好地保持群速度的特性。

3 数值算例比较和验证

3.1 计算精度和误差

算例 1^[12] 计算函数 $f(x) = \sin(x)$, $x \in [0, 2\pi]$ 的一阶导函数验证 OCS4 格式的计算精度并与具有同样精度的 SCS4 格式比较计算误差。其精确解为 $f'(x) = \cos(x)$, $[0, 2\pi]$ 。

此算例具有周期性边界条件,计算时采用追赶法求解循环三对角方程组^[13]即可。

表 3 中的数值均采用 2 范数误差计算。表 3 结果表明,OCS4 和 SCS4 格式在实际计算中都能达到 4 阶计算精度,但在同样网格剖分下,OCS4 格式的计算误差比 SCS4 格式小。

表 3 OCS4 和 SCS4 格式在不同网格剖分下的误差和计算精度
Table 3 Errors and computational accuracy of the two staggered schemes in different grids

| 格点 | 误差 | | 精度 | |
|----|-------------------------|-------------------------|--------|--------|
| | OCS4 | SCS4 | OCS4 | SCS4 |
| 10 | 1.1541×10^{-3} | 3.8408×10^{-3} | 3.9467 | 4.0253 |
| 20 | 1.0583×10^{-4} | 3.3357×10^{-4} | 3.9877 | 4.0065 |
| 40 | 9.4331×10^{-6} | 2.9351×10^{-5} | 3.9970 | 4.0016 |

算例 2 计算如下函数^[5]的导函数比较 3 种格式模拟高波问题的效果:

$$u(x) = \begin{cases} \sin(\zeta x) \exp[-16(x-0.5)^2] & 0 < x < 3 \\ 0 & x < 0 \text{ 或 } x > 3 \end{cases} \quad (14)$$

其中 $\zeta=40\pi$ 。其精确解为

$$u'(x) = [40\pi \cos(40\pi x) - 32(x-0.5)] \exp[-16(x-0.5)^2] \quad 0 \leq x \leq 3 \quad (15)$$

文献[2]计算中取 $\Delta x=0.00625$ 。此时当单位波长中网格点数为 8 时,波数为 $2\pi/8$ 。这时的波数均在 OCS4、SCS4 和 SCS6 格式能够较好模拟的波数范围内。因此,为了说明 OCS4 格式比 SCS4 和 SCS6 在高波数范围内能较好地模拟问题,需将算例的波数调整到区间 $[0.66\pi, 0.86\pi]$ 内。

由于计算波的波数与波的频率以及网格粗细程度有关,即 $\zeta \cdot \Delta x$ 决定了波数。当 Δx 为 0.00625 时,有 $\zeta \cdot \Delta x=0.25\pi$,则 $\zeta \cdot (3\Delta x)=0.75\pi$,因此可将网格变粗;当取 $\Delta x=(3\Delta x)=0.01875$ 时,该算例的波数就在 $[0.66\pi, 0.86\pi]$ 内,此时单位波长的网格点数为 2.67。由于边界条件为 0,计算中只需利用追赶法求解三对角方程组^[14]即可。

通过计算得出,OCS4、SCS4、SCS6 格式的绝对误差分别为 11.6338,50.0512,25.9002,其中 OCS4 的误差最小,这说明 OCS4 格式比 SCS4 和 SCS6 格式在高波模拟时具有更好的效果。3 种格式计算的导函数值与绝对误差值的比较如图 4 所示。由于算例 2 的主要图像集中在区间 $[0, 1]$ 内,这里仅给出 $[0, 1]$ 内的图像。

3.2 行波解算例

分别利用 OCS4、SCS4 和 SCS6 格式计算如下行波解算例对比 3 种跳点格式保持群速度的能力。

算例 3 一维波动方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad x \in [0, 3] \quad (16)$$

初值条件为式(14)^[5],计算中取 $\Delta x=0.0125$,则根据算例 2 的分析,此时算例 3 的波数为: $(0.0125/0.00625) \cdot (2\pi/8) =$

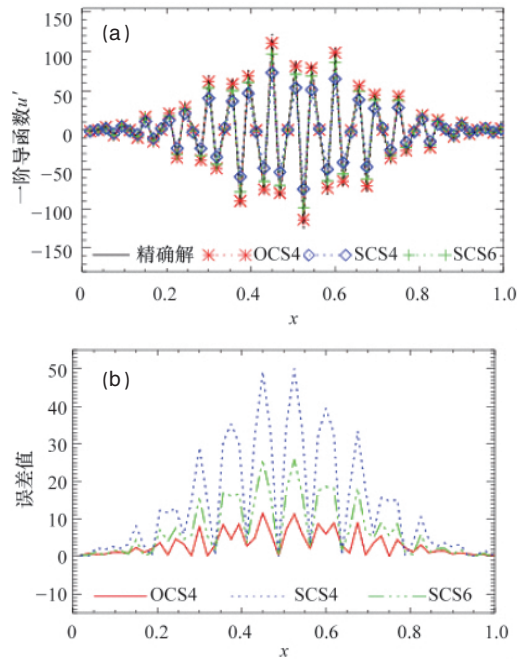


图 4 不同格式计算算例 3 的导函数 (a) 和绝对误差值 (b) 比较

Fig. 4 Comparison of different schemes for first derivative and errors of example 3

0.5π ,它在 OCS4 能够保持群速度的波数范围之内,而在 SCS4 和 SCS6 格式之外。取库朗数 (Courant number) $clf=\Delta t/\Delta x=0.6$,时间积分采用低存储空间的 LDDRK (Low-Dissipation and Low-Dispersion Runge-Kutta) 方法^[15]。利用 3 种格式分别计算 $t=0.1, t=0.2, t=0.3$ 和 $t=0.8$ 时刻的值,得到的波形图和绝对误差比较见图 5。

在算例波数为 0.5π 时,由 3 种格式的分辨率知道三者都应能较好地模拟算例,但由群速度分析知,SCS4 和 SCS6 格式在波数 0.5π 时已经不能很好的保持群速度。由图 5 看出,随着时间的增长,SCS4 和 SCS6 格式滞后于精确解的程度越来越大,而 OCS4 格式却能在更长的时间内与精确解较好地重合,说明 OCS4 格式在较高波段比 SCS4 和 SCS6 格式能更好地保持群速度。

4 结论

本文根据修正波数应在充分大的波数范围接近准确波数的优化思想及绝对误差准则,构造出比标准 3 对角 4 阶 SCS4 及 6 阶跳点紧致差分格式 SCS6 具有更高分辨能力的 3 对角 4 阶跳点紧致差分格式 OCS4 及紧致插值格式 OCI4,其分辨率分别达到 2.7018 和 1.9792。OCS4 与 SCS4 在实际计算中能达到相同精度,与 SCS6 格式有相同的计算量,但 OCS4 格式在计算具有较高波数的一阶导数时比 SCS4 和 SCS6 格式产生的误差小;在计算行波解时,OCS4 格式较 SCS4 和 SCS6 格式在更大的波数范围内能够更长时间的保持群速度。

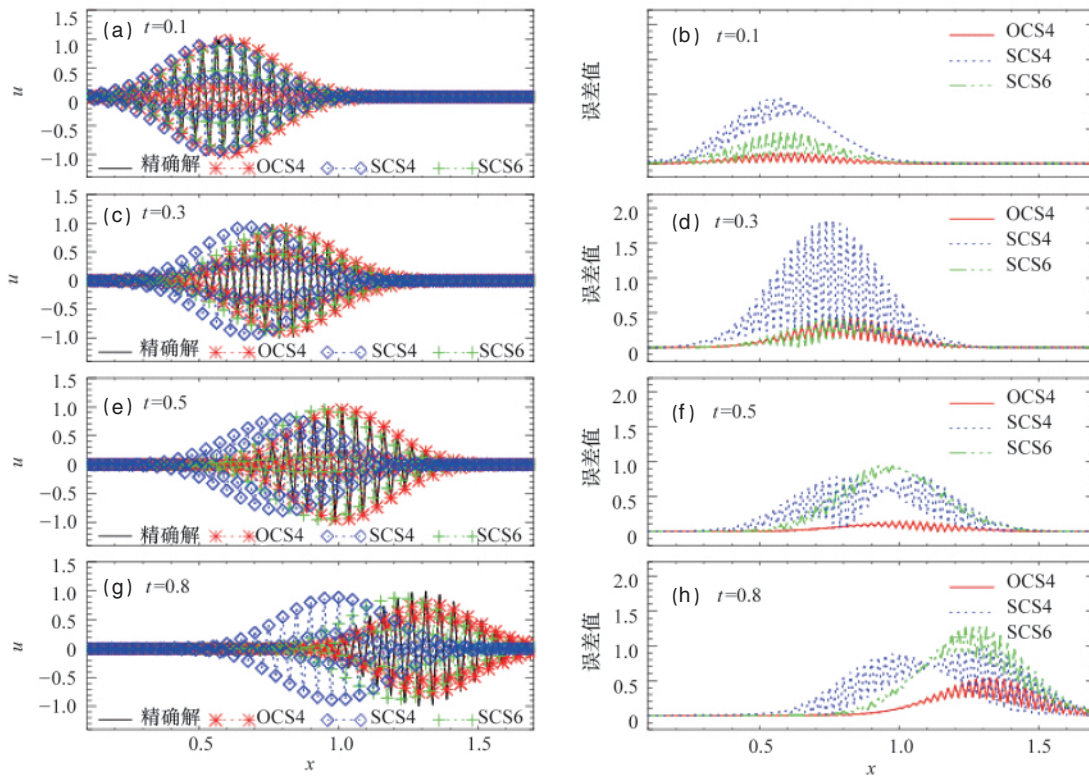


图5 随时间变化的波形图和绝对误差值比较

Fig. 5 Comparison of fluctuations and errors vs. time

参考文献 (References)

- [1] Lele S K. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution [J]. *Journal of Computational Physics*, 1992, 103(1): 16-42.
- [2] Kim J W, Lee D J. Optimized compact finite difference schemes for computational acoustics[J]. *AIAA Journal*, 1996, 34(5): 887-893.
- [3] 柳占新, 黄其柏, 胡灏, 等. 计算气动声学中的高精度紧致差分格式研究[J]. *航空动力学报*, 2009, 24(1): 83-90.
Liu Zhanxin, Huang Qibai, Hu Li, et al. *Journal of Aerospace Power*, 2009, 24(1): 83-90.
- [4] Lerat A, Corre C. A residual-based compact scheme for the compressible Navier-Stokes equations[J]. *Journal Computational Physics*, 2001, 170(2): 642-675.
- [5] 李松. 高阶精度耗散紧致差分格式的研究与应用 [D]. 四川绵阳: 中国空气动力研究与发展中心, 2007.
Li Song. Study and applications of high-order accurate dissipative compact schemes [D]. Mianyang, Sichuan: China Aerodynamics Research and Development Center, 2007.
- [6] 刘大利, 陈磊, 桂冰. 二维交错网格高分辨格式的并行实现[J]. *南京林业大学学报: 自然科学版*, 2006, 30(5): 71-75.
Liu Dali, Cheng Lei, Gui Bing. *Journal of Nanjing Forestry University: Natural Science Edition*, 2006, 30(5): 71-75.
- [7] 杨宽德, 杨顶辉, 王书强. 基于BISQ高频极限方程的交错网格法数值模拟[J]. *石油地球物理勘探*, 2002, 37(5): 463-468.
Yang Kuande, Yang Dinghui, Wang Shuqiang. *Oil Geophysical Prospecting*, 2002, 37(5): 463-468.
- [8] Nagarajan S, Lele S K, Ferziger J H. A robust high-order compact method for large eddy simulation [J]. *Journal of Computational Physics*, 2003, 191(2): 392-419.
- [9] 李文强, 刘晓. 多项式拟合数值边界格式及其稳定性分析 [J]. *河南师范大学学报: 自然科学版*, 2010, 38(1): 16-20.
Li Wenqiang, Liu Xiao. *Journal of Henan Normal University: Natural Science Edition*, 2010, 38(1): 16-20.
- [10] 李俊峰, 倪明玖. 交错网格下 MHD 相容守恒格式的发展 [J]. *核聚变与等离子体物理*, 2011, 31(3): 219-223.
Li Junfeng, Ni Mingjiu. *Nuclear Fusion and Plasma Physics*, 2011, 31(3): 219-223.
- [11] 傅德熏, 马延文. 计算流体力学 [M]. 北京: 高等教育出版社, 2002: 97-102.
Fu Dexun, Ma Yanwen. *Computational fluid dynamics*[M]. Beijing: High Education Press, 2002, 97-102.
- [12] 刘晓, 王小光, 李文强. 三对角四阶紧致差分格式的优化和初步应用 [J]. *科技导报*, 2011, 29(34): 20-26.
Liu Xiao, Wang Xiaoguang, Li Wenqiang. *Science & Technology Review*, 2011, 29(34): 20-26.
- [13] 李文强, 马民. 求解循环三对角方程组的追赶法 [J]. *科技导报*, 2009, 27(14): 69-72.
Li Wenqiang, Ma Min. *Science & Technology Review*, 2009, 27(14): 69-72.
- [14] 石东洋. 数值计算方法[M]. 郑州: 郑州大学出版社, 2007, 110-111.
Shi Dongyang. *Numerical computation method* [M]. Zhengzhou: Zhengzhou University Press, 2007, 110-111.
- [15] Hu F Q, Hussanini M Y, Manthey Y J L. Low-dissipation and low-dispersion runge-kutta schemes for computational acoustics [J]. *Journal of Computational Physics*, 1996, 124(1): 177-191.

(责任编辑 朱宇)