

差分格式的耗散、色散效应

和非线性计算

刘儒勋 夏南

(中国科学技术大学)

提 要

本文通过大量数值试验结果分析和理论分析(采用 Warming & Hyett 的 MPDE 方法),指出格式截断余项中的耗散、色散比重效应对非线性计算可靠性和稳定性有实质影响。比较了迎风、Lax, Lax-Wendroff, Mac Cormack 等格式效果及其产生的根源。进一步提出非线性计算中设计格式的着眼点和理论根据。

(一) 前 言

我们将要讨论的是初值问题差分格式的耗散、色散效应，以及它们对数值计算的重要意义。通常意义下的稳定性分析，并不能解决和认识非线性计算的可靠性和稳定性，也不能预示格式对各种间断（激波、接触间断、介质面、稀疏波和压缩波、奇点等）解的有效程度，更不能提供选择、调节、控制耗散强度的方针和办法。而耗散性与色散性分析则是达到以上目的的重要途径。

格式的截断差分余项是通常被我们略而不计的小量，往往在格式后以 $O(\Delta x^3, \Delta t^3)$ 表征它们的无足轻重。许多讨论格式稳定性、守恒性的文章，多半也是先仍掉这些高阶余项的前提下进行分析、讨论的。

然而，就是这些看来是微不足道的小量，却隐含着不可忽视的效应，体现着格式的内蕴特性。这就是近年来逐渐引起人们重视的余项耗散、色散效应，以及它们的“比重”效应问题。

本文并不想重复已有的工作，而着重于讨论耗散、色散效应与非线性的关系。我们将从数值试验和格式截断余项分析来揭示格式的耗散、色散效应，以及它们对非线性计算的作用和影响。进而提出耗散、色散“比重”效应的分析。由此出发，供我们在非线性计算中，能有的放矢地去设计、选择、改造和调整格式的耗散、色散强度，以保证达到既稳定又可靠的计算结果。

(二) 激波方程的数值试验

让我们从激波方程的初值问题：

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (1)_I$$

$$u(x, 0) = \begin{cases} 1, & \text{当 } x \leq 0 \\ 0, & \text{当 } x > 0 \end{cases} \quad (2)_2$$

的数值试验谈起。

根据弱解唯一性的熵条件 [2][3], (1) 的解仍是同样的激波。其传播速度 D 可由间断关系

$$D = \frac{[\frac{1}{2}u^2]}{[u]} = \frac{1}{2} \quad (2)$$

给出。其中 $[\cdot]$ 表示间断两侧函数值的差变, 如图 1 所示。

对问题(1)我们采用了多种差分格式, 进行了大量的数值试验。试验都是在稳定的 CFL 条件 [4] 限度内, 即步长比 $P_x = \frac{\Delta t}{\Delta x}$ 满足:

$$C = P_x \cdot |u|_{\max} \leq 1 \quad (3)$$

下面主要列出四种典型的试验格式。

(1) 迎风 (UPwind);

$$u_i^{n+1} = u_i^n + s P_x (f_i^n - f_{i+s}^n) \quad (4)$$

$$s = \begin{cases} 1, & \text{当 } u_i^n \geq 0 \\ -1, & \text{当 } u_i^n < 0, \end{cases} \quad f = \frac{u^2}{2} \quad (5)$$

(2) Lax;

$$u_i^{n+1} = \frac{1}{2} (u_{i+1}^n + u_{i-1}^n) - \frac{1}{2} P_x (f_{i+1}^n - f_{i-1}^n) \quad (6)$$

(3) Lax-Wendroff;

$$u_1^{n+1} = u_1^n - \frac{1}{2} p_x (f_{1+1}^n - f_{1-1}^n) + p_x^2 \left[\frac{1}{4} u_1^n (u_{1+1}^n - u_{1-1}^n)^2 + \frac{1}{2} (u_1^n)^2 (u_{1+1}^n - 2u_1^n + u_{1-1}^n) \right] \quad (7)$$

(4) MacCormack :

$$\tilde{u}_1 = u_1^n - p_x (f_1^n - f_{1-1}^n)$$

$$\tilde{u}_1 = \tilde{u}_1 + p_x (\tilde{f}_{1+1} - \tilde{f}_1)$$

$$u_1^{n+1} = \frac{1}{2} (u_1^n + \tilde{u}_1) \quad (7)$$

以上四种格式的数值试验结果如图 2-4 所示。图中仅画出了基本的试验步长 $\Delta x = 0.05$ 、 $\Delta t = 0.025$ (从而 $p_x = 0.5$) 的结果。同时我们也进行了不同步长比的计算试验, $p_x = 0.1 \sim 0.95$ 。现总结以下几点:

(1) 迎风 (UPwind);

由图 2 可见该格式的近似解比较接近于真解。激波虽然因格式的耗散效果而连续, 但激波宽度在 0.3 个单位以下 (控制误差以 1% 为界)。激波波头不出现非线性振荡。相比其它格式耗散效果有效而合理。

(2) Lax;

如图 3。结果的激波宽度高达 0.85 以上, 以至于很难判断激波的真实位置。这种过于平滑的近似解波形表明了该格式的耗散效果过强。这种情况在实际工作中也是需要避免的, 因为物理图象模糊也会造成很大过失误差。当然, 这种情况可以通过调整步长比

P_x 得到一定的改善。例如我们采用 $\theta_x = 0.90$ (Δx 不变, $\Delta t = 0.045$)。激波高度能降至 0.15, 但总比迎风结果差的多。而且步长比接近于 1, 波头出现振荡。这个事实表现出 Lax 格式耗散性强受 P_x (更确切地说是 Courant 数 C) 影响, 但能调节的幅度很有限。

(8) Lax - Wendroff:

我们作了多次试验, 结果对问题(1)是不稳定的, 老是发生溢出停机。这种情况在(三)中我们将会看到, 它是由于在我们的问题初条件下是一种逆耗散格式。

(9) Mac Cormack:

图 4 的计算结果表明, 它的最典型特征是激波波头有非线性振荡, 而且步长缩小时有加剧的趋势。产生这种寄生于非线性波附近的振荡现象, 对于这种格式我们说它具有强色散效果。由于这种情况使我们难以断定波峰的准确值。在实际计算工作中, 当遇到非方波的激波计算 (如强爆炸波) 时, 这种振荡的峰值容易造成误差。因而非线性计算一般应当避免和抑制色散效果。

我们也作了一个很有趣的试验。大家知道, 若在激波方程(1), 的右边加一很小的三阶色散项, 即为 KdV 方程:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = \mu \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}, \quad \mu = -1.84 \times 10^{-4} \quad (9)$$

它有孤立波解, 当初值为:

$$u(x, 0) = 30 \operatorname{sech}^2(kx + d) \quad (10)$$

$$(C = 0.3, \quad d = -6, \quad k = \frac{1}{2} (C/|u|)^{\frac{1}{2}}),$$

其解也是同一孤立波, 它沿 x 方向传播。即为:

$$u(x, t) = 0.5 \operatorname{sech}^2(kx - bt + 1)$$

$$(b = ck),$$

(11)

这种孤立子守恒现象的事实本身，表现了所加色散项虽微弱，原始方程产生了实质的影响。

我们用波方程(1)和初条件(9)作了多种格式试验。迎风格式(5)的结果比较合理。数值解呈现发展成波浪的趋势；Lax格式(3)成惊人的衰减；而MacCormack(3)的结果说明前方有范围越来越大的振荡区间。如图5、6。

此外，我们还作了多阶梯形波和稀疏波初值的试验，以上各格式所呈现的特性仍然十分鲜明。同样生动地体现了迎风格式的耗散效应适中，Lax格式太强，MacCormack格式色散效应明显。

这使我们要问，为什么都在稳定的约束条件(8)内，不同格式却呈现不同的效果？它们所表现的那种耗散、色散反应的根源何在？

这就是以下所讲的差分格式截断余项的耗散、色散效应，尤其是两者的叠加效应——我们称它为耗散、色散“比重”效应问题所决定的。

三 差分格式截断余项的 耗散、色散效应问题

关于差分格式截断余项的耗散、色散性分析，早就有Hirt[5]、Warming & Hyett[6]、Shokun[7]等的Taylor展开法（将格式用Taylor展开化成完全等价的微分方程形式，这种方程被称为Modified PDE，所以又简称为

MPDE方法)。但是他们多是以常系数方程为例，而且多是分别地分析耗散效应及色散效应，更没有与非线性计算的稳定性和可靠性密切联系。

根据论文[8]，对(1)的常系数情况

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad a > 0 \text{ 为常数.} \quad (12)$$

采用MPDE方法，可求出(9)的迎风。Lax、L-W诸格式的MPDE分别为：

(1) 迎风：

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = & \frac{a^2}{2c} (1-c) \Delta t \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \\ & - \frac{a^3}{6c^2} (1-3c+2c^2) \Delta t^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \dots \end{aligned} \quad (13)$$

(2) Lax:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = & \frac{a^2}{2c^2} (1-c^2) \Delta t \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ & + \frac{a^3}{3c^2} (1-c^2) \Delta t^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \dots \end{aligned} \quad (14)$$

(3) Lax-Wendroff (MacCormack 同样)：

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = & - \frac{a^3}{6c^2} (1-c^2) \Delta t^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \\ & - \frac{a^6}{8c^2} (1-c^2) \Delta t^2 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \dots \end{aligned} \quad (15)$$

其中 $C = a \cdot \Delta x$ 为方程(9)的 Courant 数。诸式右端即差分格式的截断余项。偶阶项为耗散项。奇阶项为色散项。

我们现在的問題是非线性計算，求激波方程格式的 MPDE 就更复杂、繁瑣。我們同樣地略去推导过程（十分沉長），只將主要結果列在下面：

(1) 迎風 (4.5)：

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = & \frac{u}{2 \Delta x} (1 - C_x u) \Delta t \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ & - \frac{u}{2 \Delta x} (1 - 3C_x + 2C_x^2 u^2) \Delta t^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \dots \end{aligned} \quad (16)$$

(2) Lax (6)：

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = & \frac{1}{2 \Delta x^2} (1 - C_x^2 u^2) \Delta t \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ & + \frac{u}{3 \Delta x^2} (1 - C_x^2 u^2) \Delta t^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \dots \end{aligned} \quad (17)$$

(3) Lax-Wendroff (MacCormack 与此不同)：

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = & \left(\frac{3}{2} u^2 \cdot \frac{\partial u}{\partial x} \Delta t^2 \right) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ & - \frac{u}{6 \Delta x^2} (1 - C_x^2 u^2) \Delta t^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \dots \end{aligned} \quad (18)$$

現在可見，前兩種格式余项基本保持常系数的 MPDE 形式。因为非线性情况下 $C_x u$ 即 Courant 数 C 。（見(8)式）。不同的是 L-M 格式，它仍有二阶导数的耗散项，但系数却含有 $\frac{\partial u}{\partial x}$ ，且是 Δt^2 阶小

• • •

量。这表明 $\frac{\partial u}{\partial x} < 0$ 时将为逆耗散，即便 $\frac{\partial u}{\partial x} > 0$ 时由于含有 Δt^2 将是弱耗散而弱色散的。各格式共同点是都含 νx ，即会通过调整步长而有限度地校正耗散、色散强度，此外，余项中本来还有

$(\frac{\partial u}{\partial x})^2$ 或 $(\frac{\partial u}{\partial x})^3$ 的非线性项，关于它们的效应试验与分析我们将另作讨论。

如果不计高阶项，(15) - (18) 诸方程的相当于著名的 KdV-Burgers 方程，

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \mu \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \quad (19)$$

不同格式具有不同的 ν 、 μ ，它们的相互强弱对比也就很不相同。这里相应的 μ ， ν 我们称为其 MPDE 的耗散主项系数和色散主项系数。现在来研究它们的相互关系和对非线性计算的影响。不失一般性，我们假定 ν ， μ 为常数来作进一步讨论。

方程 (19) 的理论分析和数值试验已有 Gard 和 Hu [8]、Ganosa [9]、Ganosa 和 Gazdag [10] 等工作。论文 [10] [11] 从理论上指出 $\nu^2 > 4|\mu|$ 时，方程 (19) 的耗散项

$\nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 起主导作用，呈耗散优势，它使激波初值 (1)₂ 很快发展为 (光滑的) 稳定的激波；反之，当 $\nu^2 < 4|\mu|$ 时，色散项起主导作用，呈色散优势，它使激波上均产生非线性振荡。特别当 $\nu^2 \ll 4|\mu|$ 时，初始激波发展为 $\nu = 0$ 、 $u(\pm\infty) = 0$ 的 KdV 方程孤立波解，我们称 ν^2 和 $4|\mu|$ 的这种相对关系引起的叠加效应为余项的耗散、色散“比重”效应。

论文[12]通过数值试验,完全证实了 ν^2 与 $4|\mu|$ 的比重应在KdV-Burgers方程激波初值情况下的表现。特别是当 $\nu^2 \gg 4|\mu|$ 时,即使在激波初值(1)₂的波头上给以相当大的方波扰动,仍能很快发展为稳定激波,但其宽度很大;当 $\nu^2 \ll 4|\mu|$ 时,计算结果随着时间的增长,其激波上游的振荡愈烈,幅度甚至超过激波幅度。而且向远上游发展,因而导致解的完全失真。这仍是一种非线性计算的不稳定现象。如图7、8。

我们除了作了[12]的相当试验外,也作了孤立波初值(10)的数值试验,同样很有力地表现出 $\nu^2 \sim 4|\mu|$ 的这种比重关系及非线性的实真作用。

由KdV-Burgers方程的分析和试验的结果,自然在很大程度上体现了格式余项的耗散,色散主项系数的关系。为此我们又对KdV-Burgers方程进行了以上两种初值,多种格式试验,结果相符的。

(四) 结 论

综上所述,我们总结以下几点结果和看法,提出来讨论。

1、差分格式的截断余项的构成,决定着格式对非线性计算的适应性和有效应。耗散余项决定着格式的耗散效应;色散余项决定着格式的色散效应。特别是耗散,色散的比重效应决定了格式在非线性计算中的基本性质。

2、在非线性计算中,格式截断余项的耗散、色散“比重”效应对数值的稳定、可靠性有实真的意义。因此必须根据实际合理设计,选择适应的耗散格式。对非线性波计算要采用耗散优势格式。

同时要利用 P_x 和 C 可能地调节耗散强度, 以保证有合理可靠的物理图象。

3、MPDE 方法 [6] 是分析非线性计算稳定、耗散、色散性的有效方法。采用耗散效应与色散效应“比重”分析基本上可以体现格式的特性。

4、根据数值试验, 可见迎风型格式引入的耗散效应比较适中, 这也就解释了许多非线性问题数值解中迎风型格式有更好的结果的根源。也可以看到 Lax 格式耗散性太强, 而 MacCormack 格式的色散效果突出, 这两类格式在非线性波计算中都容易失真。而 Lax-Bandorff 格式不值得推荐。但是这些不太理想的格式可以通过引入 PУССНОВ 型的人工耗散项得到改造。而且 MPDE 的余项部分的分析恰好给这种人工耗散项提供了根据。

参 考 文 献

- (1) R. D. Richtmyer, and K. W. Morton,
《Difference Methods for initial value problems》, John Wiley & sons, 1967.
- (2) O. A. Oleinik (Олейник), Amer. Math. Soc.
Transl. ser. 233 (1963) 288-290.
- (3) A. J. Chorin, and J. E. Marsden,
《A Mathematical Introduction to Fluid
Mechanics》 Springer-Verlag, 1979.
- (4) R. Courant, K. O. Friedrichs, and H. Lewy,
Mathematische Annalen, 100 (1928) 32-
- (5) C. W. Hirt, J. Comp. Phys. 2 (1968) 339-
- (6) R. P. Warming, and V. T. Hyett, J. Comp. Phys
14 (1974) 159-
- (7) Ю. Е. Щкин, «Метод дифференциального
Приближения», НАУКА, 1979
- (8) H. Gerd, and P. M. Hu,
Phys. Fluids, 10 (1976) 2596-
- (9) J. Ganso,
IBM J. Res. Develop. 17 (1973) 307-
- (10) J. Ganso, and J. Gazdag,
J. Comp. Phys. 23 (1977) 293-

激波速度 $a = 0.5$

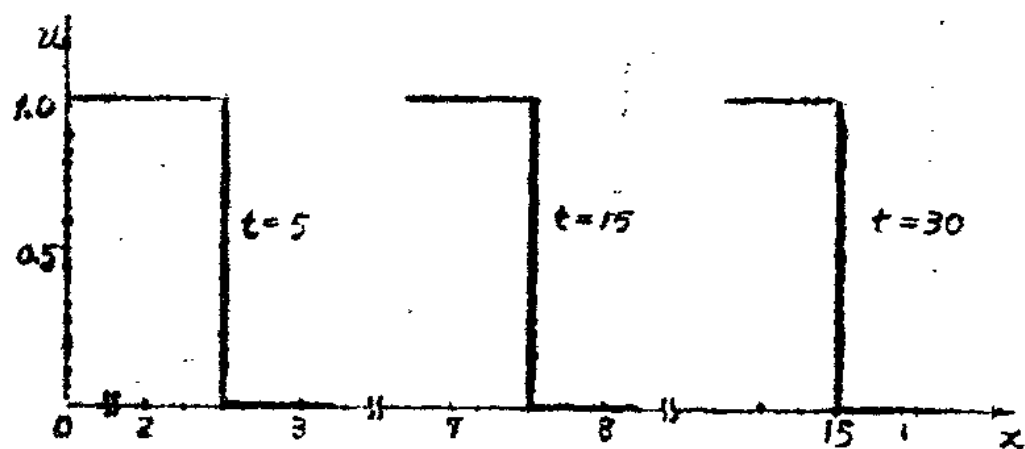


图 1、激波方程(1)的解

激波速度 $a = 0.5$

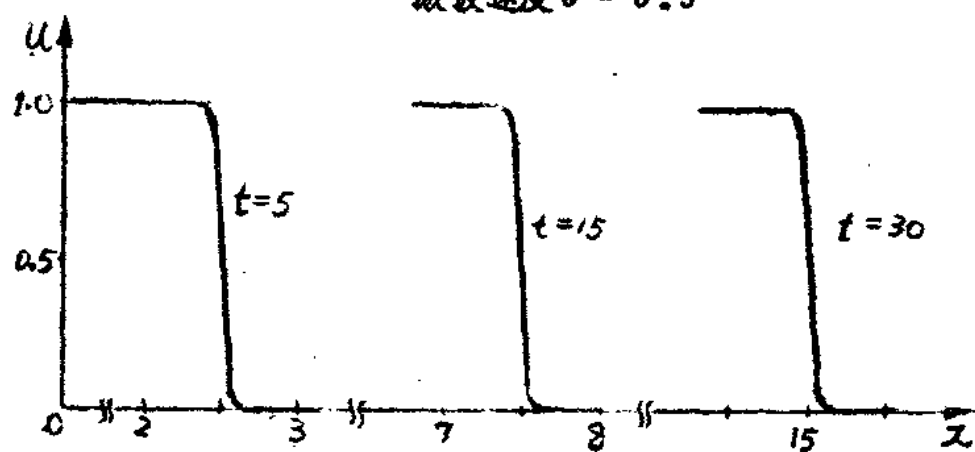


图 2. 迎风格式 $\Delta x = 0.05 \Delta t = 0.025$

激波宽度 $\Delta s = 0.2$ ($\epsilon = 10^{-2}$)

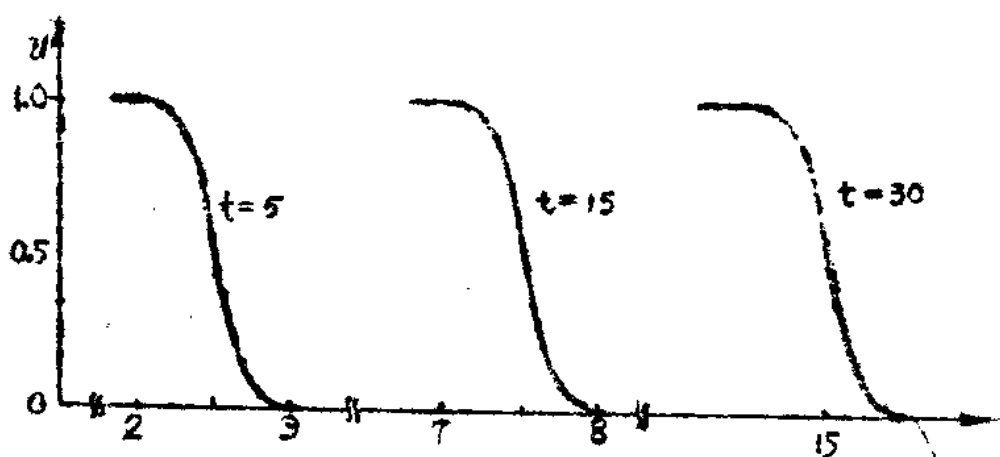


图3、Lax格式 $\Delta x = 0.05$ $\Delta t = 0.025$

激波宽度 $\Delta s = 0.85 (\epsilon = 10^{-2})$

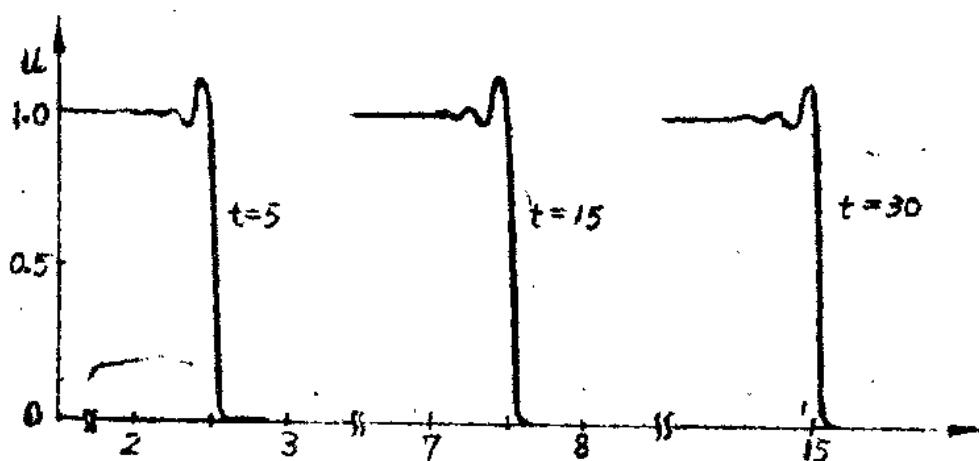


图4、MacCormack格式 $\Delta x = 0.05$ $\Delta t = 0.025$

激波宽度 $\Delta s = 0.15 (\epsilon = 10^{-2})$

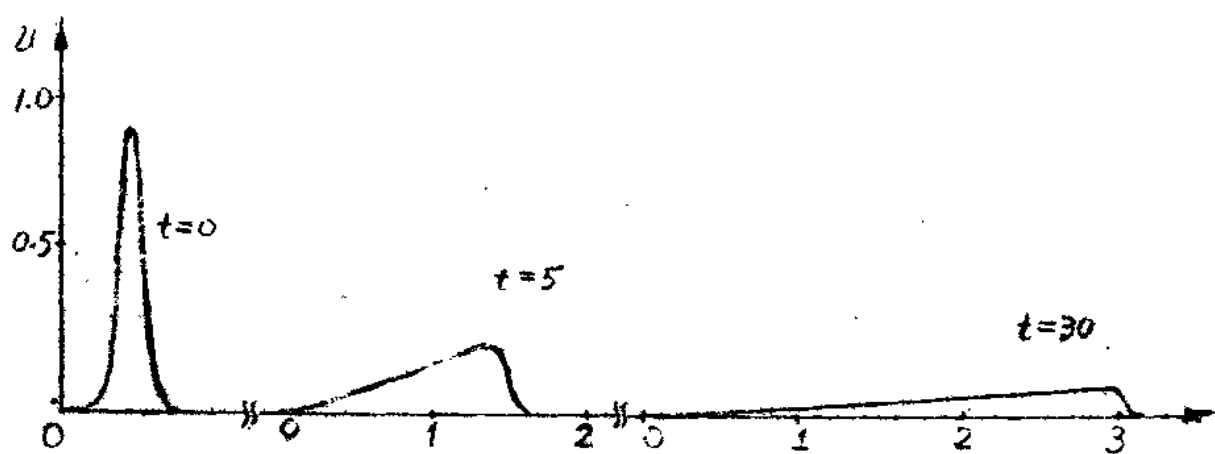


图5 迎风格式 孤立子初值 $\Delta x = 0.05$, $\Delta t = 0.05$

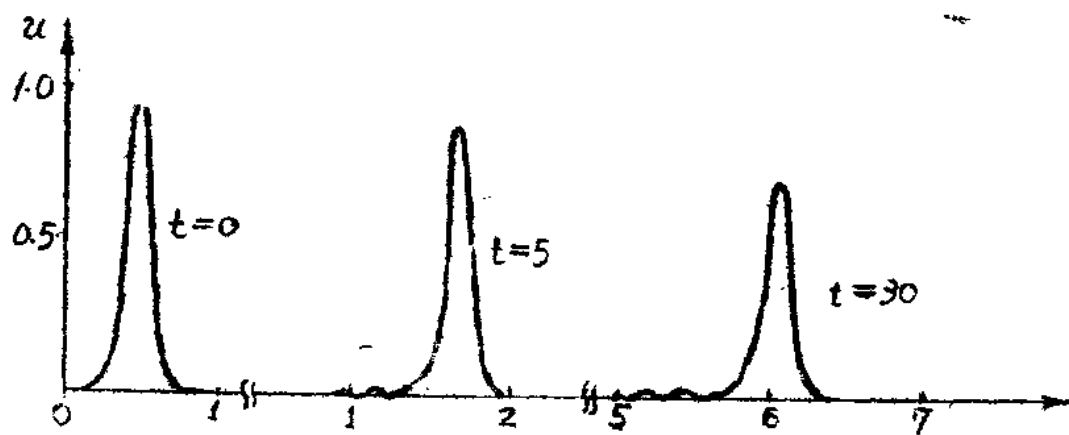


图6 Madgornack 格式 孤立子初值 $\Delta x = 0.05$,
 $\Delta t = 0.05$, kdv方程 $\mu = 0.000484$

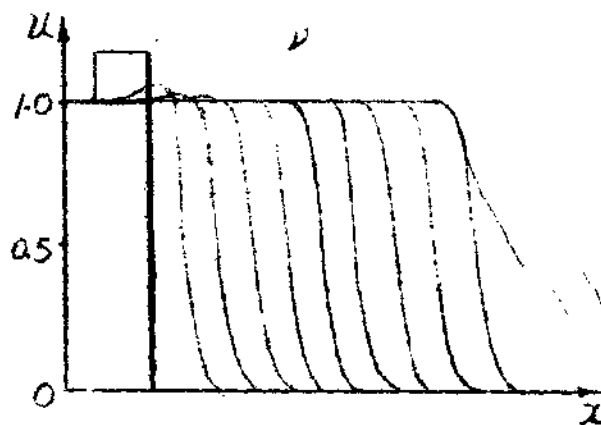


图7. KdV-Burgers 方程试验 图8. KdV-Burgers

$\nu^2 \gg 4|\mu|$

方程试验 $\nu^2 \ll 4|\mu|$

