

四阶高分辨率熵相容算法

郑素佩*, 封建湖

(长安大学 理学院, 西安 710064)

(*通信作者电子邮箱 zspnwpu@gmail.com)

摘要:针对一维 Burgers 方程和一维 Euler 方程组的数值求解问题,提出了一种四阶高分辨率熵相容算法。新算法时间方向采用半离散方式,空间方向应用四阶中心加权基本无振荡(CWENO)重构方法,数值通量引入 Ismail 通量函数,将新的四阶算法应用于静态激波问题、激波管问题以及强稀疏波问题的数值求解中,并将所得结果同准确解以及已有算法所得结果进行了分析与比较。数值结果表明:新算法计算结果正确、分辨率高,能够准确捕捉激波及稀疏波,并能有效避免膨胀激波的产生。新算法适用于准确解决一维 Burgers 方程和一维 Euler 方程组的数值求解问题。

关键词: 双曲守恒律方程;半离散方法;四阶格式;优化龙格-库塔法

中图分类号: O241.8 **文献标志码:** A

Fourth-order high-resolution entropy consistent algorithm

ZHENG Supei*, FENG Jianhu

(School of Sciences, Chang'an University, Xi'an Shaanxi 710064, China)

Abstract: The fourth-order entropy consistent schemes were proposed for one-dimensional Burgers equation and one-dimensional Euler systems. Semi-discrete method was used in time, the fourth-order Central Weighted Essentially Non-Oscillatory (CWENO) reconstruction was utilized in space and the Ismail's numerical flux function was introduced for the new algorithm. The new scheme was applied for the static shock wave, the Sod shock tube and strong rarefaction wave problems. The numerical results were compared with their corresponding exact solutions and the other existing algorithms' results. According to the results, this new method has higher resolution than Roe's algorithm, the central upwind schemes and Ismail's method have. Moreover, the new algorithm can accurately capture the shock waves and the rarefaction waves without non-physical oscillations. In a word, it is a feasible and accurate numerical method for one-dimensional Burgers equation and one-dimensional Euler systems.

Key words: hyperbolic conservation law equation; semi-discrete method; fourth-order scheme; optimal Runge-Kutta method

0 引言

流体力学和空气动力学中的许多方程均可写成如下双曲守恒律形式:

$$u_t + f(u)_x = 0 \quad (1)$$

其中 $u \in \mathbf{R}^n$ 。该类方程(组)弱解不唯一,文献[1]给出了弱解的概念,并指出满足如下熵不等式的解是方程(1)具有物理意义的唯一弱解。

$$U_t + F(U)_x \leq 0 \quad (2)$$

其中: U 称为熵函数, F 称为熵通量, (U, F) 为熵对。方程不同,熵对的具体表达式可能不同。

Tadmor^[2]首次提出了熵守恒数值求解格式,但这种算法只能用于求解连续性问题,在处理间断问题时会因为总熵不耗散而出现严重的数值振荡。Tadmor^[3]还提出了熵稳定算法,该算法可以用于连续问题与间断问题的数值求解,但该算法在捕捉激波与接触间断时不够精确(总熵不能恰当耗散达到熵相容)。Ismail 等^[4-8]基于能够准确捕捉间断的 Roe 算法,从物理概念本身出发,构造出相应的熵相容算法,通过参数调节,实现对若干问题的准确求解。为叙述问题的方便,本

文称该类算法为 Ismail 熵相容算法。该类算法保留了原有 Roe 算法准确捕捉间断的优势,且避免了 Roe 算法在解决强稀疏波问题时出现的膨胀激波现象以及求解二维 Euler 方程组问题时出现的“红斑”现象。但该类算法在空间方向只有一阶精度,分辨率低。

鉴于此,作者在文献[9]中引入三阶中心基本无振荡(Central Weighted Essentially Non-Oscillatory, CWENO)型重构方法^[10]将 Ismail 熵相容算法的精度提高到三阶,构造了三阶 CWENO 型熵相容算法,并将其应用于若干典型双曲守恒律方程(组)的数值求解中。本文将算法精度进行进一步提高,构造出四阶高分辨率熵相容算法,并将该算法应用于若干典型问题的数值求解中。数值结果表明:新算法计算结果正确,且保留了原有三阶熵相容算法的优点,新算法的分辨率比三阶熵相容算法的分辨率高。

1 空间离散

为简单起见,空间方向采用均匀网格,记单元 $I_i = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$, 步长 $\Delta x = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$, 单元均值 $\bar{u}_i^n(t) =$

收稿日期:2013-03-22;修回日期:2013-05-12。

基金项目:国家自然科学基金资助项目(11171043);中央高校基本科研业务费专项资金资助项目(CHD2012TD015, 2013G1121088)。

作者简介:郑素佩(1978-),女,河南许昌人,讲师,博士,主要研究方向:偏微分方程数值解法、计算流体力学;封建湖(1960-),男,陕西子洲人,教授,博士,主要研究方向:偏微分方程数值解法、计算流体力学、图像处理。

$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} u(x, t^n) dx / \Delta x$. 守恒型半离散格式的一般表达式如下:

$$\frac{d\bar{u}_i}{dt} = - (G_{i+1/2} - G_{i-1/2}) / \Delta x := M_i(\bar{u}_i) \quad (3)$$

其中 G 为数值通量函数。熵相容数值通量函数 $G_{i+1/2}$ 包括两部分,即:对称部分的熵守恒数值通量函数和非对称部分的熵增数值通量函数,记 $G_{i+1/2} = f_{i+1/2}^{EC} + f_{i+1/2}^{EP}$, 其中 $f_{i+1/2}^{EC}$ 为“熵守恒”数值通量函数,而 $f_{i+1/2}^{EP}$ 是“熵增”数值通量函数,下面给出这两类数值通量函数的具体构造过程。

1.1 熵守恒通量

定义 如果存在一个凸函数 U , 则熵变量 $v = \frac{\partial U}{\partial u}$ (对标量、矢量方程均使用), 熵通量函数 F 满足 $\frac{\partial F}{\partial U} = \frac{\partial f}{\partial u}$ (对标量方程), 熵守恒通量函数 F 满足 $[v \cdot f] - [v]^T f^{EC} = [F]$ (其中 $[\cdot]$ 表示左右界面变量值的差,下同)^[6]。

当方程(1)中 $f(u) = u^2/2$ 时,可取熵函数 $U = u^2$, 熵变量 $v = 2u$, 熵通量函数 F 满足下式:

$$\frac{\partial F}{\partial U} = \frac{\partial f}{\partial u} = u = U^{1/2} \Rightarrow F = \frac{2U^{3/2}}{3} = \frac{2u^3}{3}$$

相应的熵守恒通量函数如下:

$$\begin{aligned} f^{EC} &= ([vf] - [F]) / [v] = ([u^3] - [2u^3/3]) / [2u] = \\ &= [u^3] / [6u] = \\ &= \{(u_R - u_L)(u_R^2 + u_R u_L + u_L^2)\} / \{6(u_R - u_L)\} = \\ &= (u_R^2 + u_R u_L + u_L^2) / 6 \end{aligned}$$

由上面推导知:熵对不唯一。

对 Euler 方程组,方程(1)中变量 u 与函数 $f(u)$ 的具体表达式如下:

$$\begin{aligned} u &= (\rho, \rho u, \rho E)^T \\ f(u) &= (\rho u, \rho u^2 + p, \rho u H)^T \end{aligned}$$

总能量 $E = e + u^2/2$, 比内能 $e = p / \{(\gamma - 1)\rho\}$ (其中 γ 为理想气体常数,取 $\gamma = 1.4$), 总熵 $H = E + p/\rho$ 。一般取熵函数 $U = -\rho S / (\gamma - 1)$, 这是 Euler 方程组和 Navier-Stokes 方程组唯一通用的熵函数,熵通量函数取为 $F = -\rho u S / (\gamma - 1)$, 则熵变量 v 的具体表达式如下:

$$v = \frac{\partial U}{\partial u} = \begin{bmatrix} (\gamma - S) / (\gamma - 1) - \rho u^2 / (2p) \\ \rho u / p \\ -\rho / p \end{bmatrix}$$

熵守恒通量函数满足定义式 $[v \cdot f] - [v]^T f^{EC} = [F]$, 此时守恒通量函数有三个分量需要确定,但仅有这一个方程,因此需要先确定某些量^[6] (这和标量方程相应公式的推导不同),进而得出另一些量的表达式。最终得

$$f^{EC} = \begin{bmatrix} \bar{z}_2 z_3^{\ln} \\ (\bar{z}_3 + \bar{z}_2 z_3^{\ln}) / z_1 \\ \frac{\bar{z}_2}{2\bar{z}_1} \left(\frac{(\gamma + 1)z_3^{\ln}}{(\gamma - 1)z_1^{\ln}} + \frac{\bar{z}_3 + \bar{z}_2 z_3^{\ln}}{z_1} \right) \end{bmatrix}$$

其中 $z_1 = \sqrt{\rho/p}$, $z_2 = u \sqrt{\rho/p}$, $z_3 = \sqrt{\rho p}$; $\bar{z}_i = (z_{i,L}, z_{i,R})$ ($i = 1, 2, 3$), $z_i^{\ln} = L(z_{i,L}, z_{i,R})$ ($i = 1, 2, 3$), 而 $(x, y) = (x + y)/2$, $L(x, y) = (x - y) / \{\ln(x) - \ln(y)\}$ 分别表示变量 x, y 的算术平均值与对数平均值,在程序编制过程中对数平均值 $L(x, y)$ 采用文献[6]算法。

1.2 熵相容通量

在间断区域,为达到熵相容,数值通量函数需要满足如下

等式^[9]:

$$[v] \bar{f} = ([vf] - [F]) + ([F] - \Lambda[U])$$

由此得,当方程(1)中 $f(u) = u^2/2$ 时,在间断区域,为达到熵相容,数值通量函数应达到的量值应为:

$$\begin{aligned} \bar{f} &= ([vf] - \Lambda[U]) / [v] = \\ &= ([u^3] - [u^2](u_R + u_L)/2) / (2[u]) = \\ &= \frac{(u_R - u_L)(u_R^2 + u_R u_L + u_L^2)}{2(u_R - u_L)} - \\ &= \frac{(u_R + u_L)(u_R + u_L)(u_R - u_L)/2}{2(u_R - u_L)} = \\ &= (u_R^2 + u_L^2) / 4 \end{aligned}$$

为使数值求解格式在光滑区域“熵守恒”,而在间断区域达到通量函数 f 的量值(数值通量函数在“熵守恒”基础上实现“熵相容”),熵增通量函数满足 $f_{i+1/2}^{EP} = \bar{f} - f^{EC}$ 。

当方程(1)中 $f(u) = u^2/2$ 时,熵增数值通量函数

$$\begin{aligned} f^{EP} &= \bar{f} - f^{EC} = \\ &= (u_R^2 + u_L^2) / 4 - (u_R^2 + u_R u_L + u_L^2) / 6 = \\ &= (u_R^2 - 2u_R u_L + u_L^2) / 12 = [u]^2 / 12 = \\ &= [\lambda][u] / 12 \end{aligned}$$

其中 $\lambda = \frac{\partial f}{\partial u} = u$ 为波传播速度。

综上,基于 Roe 型数值通量函数,一维标量方程 Ismail 熵相容数值通量函数表达式如下:

$$G_{i+1/2} = f^{EC} - (\lambda_{Roe}^* + \left| \frac{\partial f}{\partial u} \right| / 6) [u] / 2 \quad (4)$$

其中 $\lambda_{Roe}^* = \left| \frac{\partial f(u_L)}{\partial u} + \frac{\partial f(u_R)}{\partial u} \right| / 2$ 。

一维 Euler 方程组的 Ismail 熵相容数值通量函数表达式^[6]如下:

$$G_{i+1/2} = f^{EC} - \hat{R}(|\hat{\Lambda}| + \alpha |\hat{\Lambda}'|) \hat{S} \hat{R}^T [v] / 2 \quad (5)$$

其中 \hat{R} 是 Euler 方程组对应的 Jacobi 矩阵的右特征向量构成

的均值矩阵, $\hat{R} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \bar{u} - \bar{a} & \bar{u} & \bar{u} + \bar{a} \\ \bar{H} - \bar{u}\bar{a} & 1/2\bar{u}^2 & \bar{H} + \bar{u}\bar{a} \end{bmatrix}$, \hat{R}^T 为矩阵 \hat{R}

的转置; 对角阵 $\hat{\Lambda} = \text{diag}(\bar{u} - \bar{a}, \bar{u}, \bar{u} + \bar{a})$, $\hat{\Lambda}' = \text{diag}(u - a, u, u + a)$, $\hat{S} = \text{diag}(\bar{\rho}/2r, (r - 1)\bar{\rho}/r, \bar{\rho}/2r)$, 向量 $[v] = (-[S]/(r - 1) - [\rho u^2/p]/2, [\rho u/p], -[\rho/p])^T$, 式中均值采用 Ismail 均值公式(参见 1.1 节),与 Roe 均值相比这种均值更适合处理接触间断问题。

1.3 四阶熵相容算法

基于三阶 CWENO 型熵相容算法^[9],引入四阶 CWENO 重构^[11],得到如下四阶 CWENO 型熵相容数值求解算法:

$$G_{i+1/2}^{CWENO} = f_{i+1/2}^{EC}(u_{i+1/2}^-, u_{i+1/2}^+) + f_{i+1/2}^{EP}(u_{i+1/2}^-, u_{i+1/2}^+) \quad (6)$$

其中: $u_{i+1/2}^-, u_{i+1/2}^+$ 表示单元 I_i 界面处 $\bar{u}(x, t^n)$ 的值,其具体表达式参见文献[11]。

数值求解方程(1)时,时间方向采用具有强稳定特点的优化 TVD Runge-Kutta 方法^[9]。

2 数值算例

算例 1 静态激波问题。

Burgers 方程具有如下初边值条件的混合问题^[8]:

$$u(x, 0) = \begin{cases} 1, & |x| < 1/3 \\ -1, & 1/3 \leq |x| \leq 1 \end{cases}$$

计算区域为 $[-1, 1]$, 周期性边界条件, 在 $t = 0.32$ 时刻的数值结果如图 1 所示。

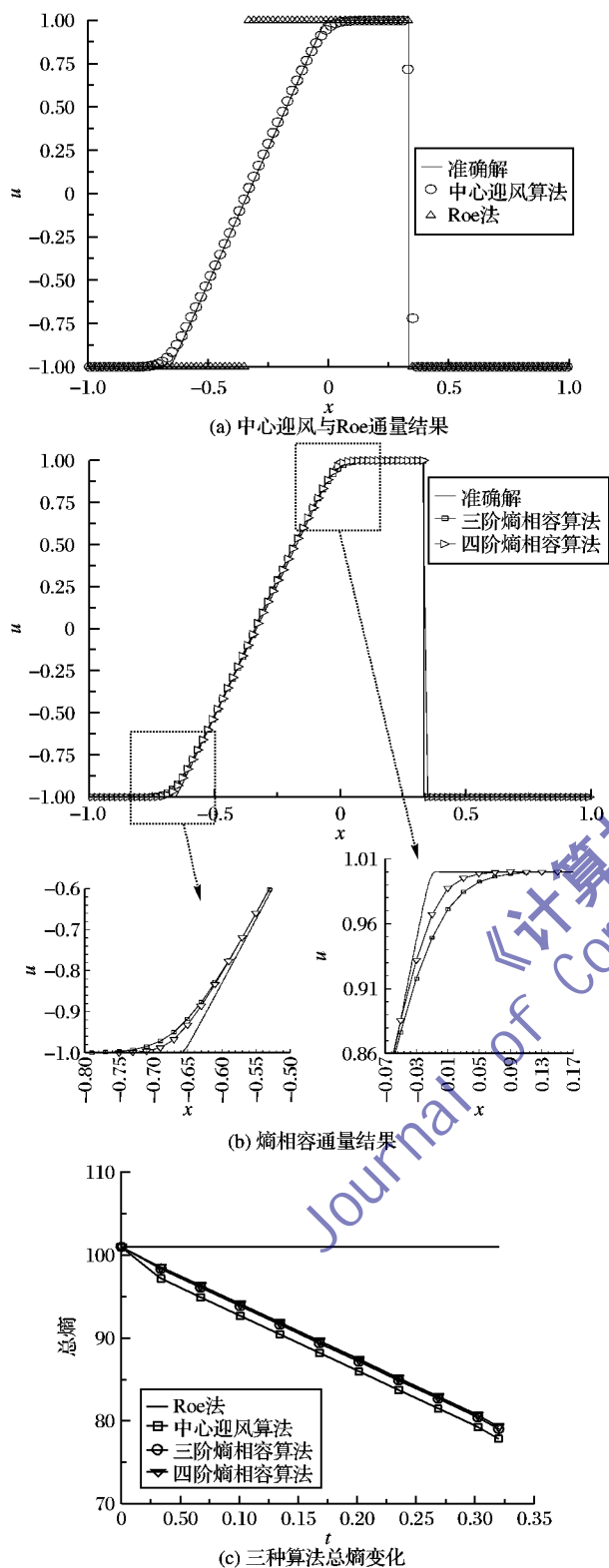


图 1 算例 1 在 $t = 0.32$ 的速度及总熵变化

图 1 给出了 Roe 法^[13]、中心迎风算法^[12]及熵相容算法的数值结果。图 1(a) 中两种算法空间、时间方向同本文离散方法相同, 从中可看出, Roe 法所得结果产生了膨胀激波, 这是由于该算法在定义波传播速度的局限性所致。三阶^[9]、新的四阶 CWENO 型熵相容通量函数保留了 Roe 型格式在捕捉激波时的优势 (如图 1(b) 所示), 同时克服了其在处理稀疏波时的不足, 得到了与准确解相吻合的数值结果, 四阶结果优

于三阶 (如图 1(b) 所示)。由图 1(c) 总熵耗散情况可以看出: 三阶及新的四阶 CWENO 型熵相容算法总熵持续耗散, 其变化满足总熵耗散规律。另外, 通过将新算法所得结果同四阶中心迎风格式所得结果进行比较可以看出 (图 1(a) 与图 1(b)), 在激波区域, 新格式比中心迎风格式更准确。而由图 1(c) 总熵耗散图可以看出: 中心迎风格式总熵耗散量比新算法耗散量大, 这也从一个侧面说明了本文所构造算法做到了“熵相容”。四阶中心迎风格式的数值黏性较大, 激波抹平较严重 (见图 1(a))。此外, 由图 1(b) 可以看出: 四阶熵相容算法分辨率优于三阶熵相容算法的分辨率。

算例 2 Sod 激波管问题。

Euler 方程组满足:

$$u(x, 0) = \begin{cases} u_L, & x > 0.5 \\ u_R, & \text{其他} \end{cases}$$

$$u_L = (1, 0, 1)^T$$

$$u_R = (0.125, 0, 0.1)^T$$

在 $t = 0.25$ 时刻的数值结果如图 2 所示。

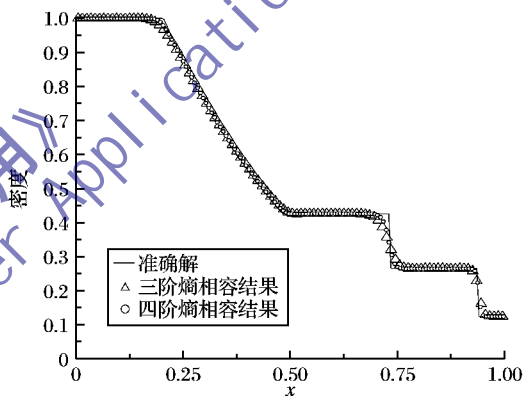


图 2 算例 2 在 $t = 0.25$ 时刻的密度变化

由图 2 所示结果可以看出: 新的四阶格式所得结果与准确解相吻合, 四阶格式分辨率优于三阶格式的分辨率。

算例 3 强稀疏波问题

Euler 方程组满足:

$$u(x, 0) = \begin{cases} u_L, & x < 0 \\ u_R, & \text{其他} \end{cases}$$

在区间 $[-10, 15]$ 上, $u_L = (1, 0, 0, 100\,000.0)^T$, $u_R = (0.01, 0, 0, 1000.0)^T$, 在 $t = 0.01$ 时刻数值结果如图 3 所示。

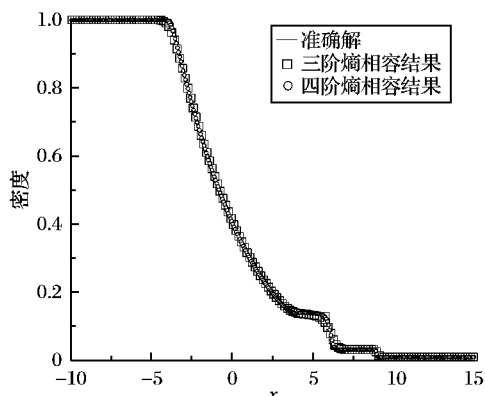


图 3 算例 3 在 $t = 0.01$ 时刻的密度变化

由图 3 可看出: 新算法所得数值结果与准确解相吻合, 没有出现膨胀激波以及大的数值抹平现象, 四阶算法分辨率优于三阶算法的分辨率。

(下转第 2427 页)

从上述数据还可看到,对相同数据规模,两种方式下读文件的时间均比写文件的时间短得多,故写文件的时间对整体性能的影响更大。另外,在 CFD 计算中,对数据文件的访问方式往往是一次读(读初始网格数据或重启计算文件)、多次写(写中间计算结果文件、重启动文件等),故提高写文件性能具有特别的价值。

4 结语

本文针对结构网格 CFD 并行计算中对数据 I/O 能力的需求,研究了 HDF5 数据存储格式及其并行 I/O 技术,基于 HDF5 实现结构网格 CFD 程序网格数据的并行 I/O。在并行计算机系统上进行了性能测试,结果表明基于 HDF5 并行 I/O 方式的写文件性能比每进程独立写普通文件的并行 I/O 方式高约 6.9 ~ 16.1 倍,基于 HDF5 并行 I/O 方式的读文件性能不及后者,约为后者的 20% ~ 70%,但是读文件的时间开销远小于写文件的时间开销。本文工作表明 HDF5 在结构网格 CFD 程序并行 I/O 中的应用前景。

参考文献:

- [1] 张月玲, 白文. 航空高性能计算和数据处理需求评论[J]. 航空计算技术, 2009, 39(1): 146 - 150.
- [2] DONGARRA J, FOSTER I, FOX G. 并行计算综论[M]. 莫则尧, 陈军, 曹小林, 等译. 北京: 电子工业出版社, 2005.
- [3] 陈志刚, 曾碧卿. HPPHM: 多维数据并行 I/O 存储新策略及其性能研究[J]. 通信学报, 2007, 28(4): 57 - 64.
- [4] 杨伟光. 并行程序中不同 I/O 实现方式的设计与 I/O 性能[D]. 呼和浩特: 内蒙古大学, 2006.
- [5] PAKALAPATI P D. Benchmarking parallel I/O performance for computational fluid dynamics applications[C]// Proceedings of the 43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. Washington,

DC: AIAA, 2005.

- [6] HORNE K, BENSON N. An efficient and flexible parallel I/O implementation for the CFD general notation system[R]. Salt Lake City: Utah State University, Center for High Performance Computing, 2009.
- [7] 张娟, 陆林生. 应用层并行 I/O 效率研究[J]. 计算机应用, 2009, 29(1): 9 - 11.
- [8] 颜小洋, 张伟文, 布社辉, 等. 计算与通信重叠和并行 I/O 在粒子模拟中的应用[J]. 计算机应用, 2011, 31(S1): 33 - 39.
- [9] 蔡昭权, 吴文忠, 卢庆武, 等. 利用 HDF5 和 Esper 的高效外汇数据分析系统[J]. 计算机工程与科学, 2011, 33(4): 159 - 163.
- [10] RITTER M. Introduction to HDF 5 and F 5 [D]. Innsbruck: Leopold-Franzens University of Innsbruck, Institute of Computer Science, 2007.
- [11] 冯金花, 陈建政. 基于 HDF5 文件格式的数据管理系统[J]. 计算机与数字工程, 2011, 39(2): 102 - 103.
- [12] 沈卫超, 曹立强, 夏芳, 等. 面向数值模拟数据的 HDF5 性能优化[J]. 计算机研究与发展, 2012, 49(S1): 314 - 318.
- [13] YANG M Q, KOZIOL Q. Parallel HDF5 hints[R]. Urbana-Champaign: The HDF Group, 2010.
- [14] YANG K. Parallel HDF5 introductory tutorial[R]. Urbana-Champaign: The HDF Group, 2008.
- [15] YANG M Q, KOZIOL Q. Using collective IO inside a high performance IO software package — HDF5[R]. Urbana-Champaign: University of Illinois at Urbana Champaign, National Center for Supercomputing Applications, 2010.
- [16] CHEY G, XU C F, WU J P, et al. Optimization and evaluation of a low mach number flow simulator on tianhe-1A supercomputer [C]// Proceedings of the 23th International Conference on Parallel Computational Fluid Dynamics. Barcelona: IEC, 2011.

(上接第 2418 页)

3 结语

针对典型的一维双曲守恒律方程(组)的数值求解问题, 本文构造了四阶 CWENO 型熵相容算法, 并将新算法应用于若干问题的数值求解当中。通过对所得结果的比较与分析, 所得结论如下:

- 1) 新算法所得数值结果正确;
- 2) 新算法不仅可以处理 Roe 型格式不能处理的静态激波问题, 而且保留了 Roe 型格式能准确捕捉激波的特点;
- 3) 新算法可以避免强稀疏波问题中的膨胀激波产生;
- 4) 新算法比三阶 CWENO 型熵相容算法分辨率高。

新算法在空间方向离散时引入了四阶 CWENO 重构, 时间方向采用半离散方式, 该算法易于编程实现。

参考文献:

- [1] OSHER S. Riemann solvers, the entropy condition, and difference approximations [J]. SIAM Journal on Numerical Analysis, 1984, 21(2): 217 - 235.
- [2] TADMOR E. Numerical viscosity and the entropy condition for conservative difference schemes [J]. Mathematics of Computation, 1984, 43(168): 369 - 381.
- [3] TADMOR E. The numerical viscosity of entropy stable schemes for systems of conservation laws [J]. Mathematics of Computation, 1987, 49(179): 91 - 103.
- [4] MOHAMMED A-N, ISMAIL F. Study of an entropy-consistent Navier-Stokes flux[J]. International Journal of Computational Fluid Dynamics, 2013, 27(1): 1 - 14.
- [5] ISMAIL F, ROE P-L. Affordable, entropy-consistent Euler flux

functions II: entropy production at shocks [J]. Journal of Computational Physics, 2009, 228(15): 5410 - 5436.

- [6] ISMAIL F. Towards a reliable prediction of shocks in hyperbolic flow: resolving carbuncles with entropy and vorticity control [D]. Ann Arbor, Michigan: University of Michigan, 2006.
- [7] FJORDHOLM U-S, MISHRA S, TADMOR E. Entropy stable ENO scheme [R]. Zürich: Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, 2011.
- [8] FJORDHOLM U-S, MISHRA S, TADMOR E. Arbitrarily high-order accurate entropy stable essentially nonoscillatory schemes for systems of conservation laws [J]. SIAM Journal on Numerical Analysis, 2012, 50(2): 544 - 573.
- [9] 郑素佩, 封建湖, 刘彩侠. 二维双曲守恒律标量方程的三阶 CWENO-型熵相容算法[J]. 计算机应用, 2012, 32(10): 2745 - 2747.
- [10] LEVY D, PUPPO G, RUSSO G. A third order central WENO scheme for 2D conservation laws [J]. Applied Numerical Mathematics, 2000, 33(1/2/3/4): 407 - 414.
- [11] LEVY D, PUPPO G, RUSSO G. A fourth-order central WENO scheme for multidimensional hyperbolic systems of conservation laws [J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 2002, 24(2): 480 - 506.
- [12] KURGANOV A, NOELLE S, PETROVA G. Semi-discrete central-upwind schemes for hyperbolic conservation laws and Hamilton-Jacobi equations [J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 2001, 23(3): 707 - 740.
- [13] 罗力. 求解双曲守恒律方程的熵稳定格式研究[D]. 西安: 长安大学, 2011.