一维气体激波管问题 — 第 3 次作业*

徐均益† 余航‡ 陈宇韬§

中国科学技术大学核科学技术学院, 合肥 230026

中国科学技术大学物质科学研究院等离子所, 合肥 230026

摘要

课程《磁流体力学的数值模拟方法》的第三次作业,讨论一维气体激波管问题的有限差分数值解法,分别使用守恒型方程的 LaxWendroff 格式,非守恒型的 Upwind 格式和 Minmod 格式,通过理论分析和实验编程,讨论该方程的物理解和数值解的特性,并分析流体中不同波模的物理和数值特性。

1 引言

一维气体激波管问题是计算流体力学中的经典问题,也是为数不多的存在精确解的问题,常以此算例检测数值格式,方便我们进一步学习研究各种数值方法,同时一维气体激波管所使用的物理方程为连续性方程、动量方程、能量方程,可以写成守恒形式,也意味着选择合适的迭代矩阵,能够化为双曲守恒形式。可以检验各种方法在守恒形式和非守恒形式下的异同。本次作业只考虑无粘滞的理想气体状态方程下的一维激波问题。

2 理论基础介绍

2.1 守恒形式

2.1.1 方程介绍

考察一维多方气体 Euler 方程

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial f(w)}{\partial x} = 0,\tag{1}$$

^{*2023} 年春季磁流体力学的数值模拟方法

 $^{^\}dagger \text{ID: SA22214015 Email: jyxu@mail.ustc.edu.cn}$

 $^{^{\}ddagger} \text{ID: SA}22168021$ Email: yh
131996@mail.ustc.edu.cn

[§]ID: SA22214014 Email: chenyut@mail.ustc.edu.cn

的 Riemann 问题 (一维气体激波管问题),其中

$$w = \begin{bmatrix} \rho \\ m \\ E \end{bmatrix}, \tag{2}$$

$$f(w) = uw + \begin{bmatrix} 0 \\ p \\ pu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m \\ (\gamma - 1)E + \frac{3-\gamma}{2} \frac{m^2}{\rho} \\ (\gamma E - \frac{\gamma - 1}{2} \frac{m^2}{\rho}) \frac{m}{\rho} \end{bmatrix}, \tag{3}$$

$$m = \rho u,$$
 (4)

$$p = (\gamma - 1)(E - \frac{1}{2}\rho u^2).$$
 (5)

这里, ρ , m 和 E 分别是密度, 质量流和能量. 其对应的三个方程分别为质量守恒方程, 动量守恒方程和能量守恒方程。守恒形式可以采用 LaxWendroff 格式设计实验。

2.1.2 特征向量计算

将方程(1)可以写成如下形式

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \mathbf{A} \cdot \frac{\partial w}{\partial x} = 0, \tag{6}$$

守恒形式下 A 的表达式

$$\mathbf{A} = \frac{\partial f}{\partial w} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0\\ \frac{1}{2}(\gamma - 3)u^2 & -(\gamma - 3)u & \gamma - 1\\ (\gamma - 1)u^3 - \gamma \frac{u}{\rho}E & \gamma \frac{1}{\rho}E - \frac{3}{2}(\gamma - 1)u^2 & \gamma u \end{bmatrix}$$

左右特征向量

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ u - c & u & u + c \\ H - uc & \frac{1}{2}u^2 & H + uc \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{L} = \frac{\gamma - 1}{2c^2} \begin{bmatrix} \frac{1}{2}u\left(u + \frac{2c}{\gamma - 1}\right) & -\left(u + \frac{c}{\gamma - 1}\right) & 1 \\ 2(H - u^2) & 2u & -2 \\ \frac{1}{2}u\left(u - \frac{2c}{\gamma - 1}\right) & -\left(u - \frac{c}{\gamma - 1}\right) & 1 \end{bmatrix}$$

其中

$$\begin{split} H = & \frac{E+p}{\rho} = \frac{c^2}{\gamma-1} + \frac{1}{2}u^2, \\ c^2 = & \gamma \frac{p}{\rho}. \end{split}$$

2.2 非守恒形式

式(1)的非守恒形式为

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{B} \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} = 0, \tag{7}$$

其中

$$\mathbf{u} = [u_j] = \begin{bmatrix} \rho \\ u \\ p \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = [B_{ij}] = \begin{bmatrix} u & \rho & 0 \\ 0 & u & 1/\rho \\ 0 & \gamma p & u \end{bmatrix}$$
(8)

此时方程(6)与方程(7)虽然形式看起来相同,同时代入后得到的三个方程也相同,但是因为方程(6)形式上可以化成守恒形式(1),而方程(7)无法化成守恒形式。因此两个方程虽然表示的是同一个物理现象但是一个为守恒形式一个为非守恒形式,分别适用于不同的差分格式。

其中,矩阵 \boldsymbol{B} 的特征值为 u-a, u, u+a ($a^2=\gamma p/\rho$), 对应的左右特征向量矩阵为 \boldsymbol{L} 和 \boldsymbol{R} 写为

$$\mathbf{L} = [L_{ij}] = \begin{bmatrix} 0 & -\rho a & 1 \\ a^2 & 0 & -1 \\ 0 & \rho a & 1 \end{bmatrix}, \tag{9}$$

$$\mathbf{R} = [R_{ij}] = \begin{bmatrix} \frac{1}{2a^2} & \frac{1}{a^2} & \frac{1}{2a^2} \\ -\frac{1}{2\rho a} & 0 & \frac{1}{2\rho a} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$
(10)

波模分解的方程为

$$\sum_{i} \left\{ L_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial t} + \lambda_i L_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x} \right\} = 0, \tag{11}$$

其中

$$\lambda_i = \begin{bmatrix} u - a \\ u \\ u + a \end{bmatrix}. \tag{12}$$

在变换回原变量方程的形式,即

$$\sum_{i} \sum_{j} \left\{ R_{ki} L_{ij} \frac{\partial u_{j}}{\partial t} + R_{ki} \lambda_{i} L_{ij} \frac{\partial u_{j}}{\partial x} \right\} = 0, \tag{13}$$

并利用 $\sum_{i} R_{ki} L_{ij} = \delta_{kj}$, 我们有

$$\frac{\partial u_k}{\partial t} + \sum_i \sum_j \left\{ R_{ki} \lambda_i L_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x} \right\} = 0, \tag{14}$$

迎风格式为

$$u_{k,l}^{n+1} = u_{k,l}^{n} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \sum_{i} \sum_{j} \left\{ \operatorname{sgn}(\lambda_{i,l}^{n}) \lambda_{i,l}^{n} R_{ki,l}^{n} L_{ij,l}^{n} \left[u_{j,l}^{n} - u_{j,l-\operatorname{sgn}(\lambda_{i,l}^{n})}^{n} \right] \right\}$$
(15)

其中下角标 l 对应于空间格点位置, 其他下角标对应于分量.

对于非守恒方程可以用迎风格式和 minmod 格式。

2.3 波模分析

由式 (8) 可得

$$\lambda_{1} = u - a, \qquad \lambda_{2} = u, \quad \lambda_{3} = u + a,$$

$$r_{1} = \begin{bmatrix} -\rho/a \\ 1 \\ -\rho a \end{bmatrix}, \qquad r_{2} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \qquad r_{3} = \begin{bmatrix} \rho/a \\ 1 \\ -\rho a \end{bmatrix}, \tag{16}$$

其中 a 是声速。更有趣的是我们可以对特征值求梯度,我们发现第二个特征场是线性退化的,第一个和第三个特征场是非线性的:

$$\nabla \lambda_{1} = \begin{bmatrix} -\frac{\partial c}{\partial \rho} \\ 1 \\ -\frac{\partial c}{\partial \rho} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c/2\rho \\ 1 \\ -c/2\rho \end{bmatrix} \implies \nabla \lambda_{1} \cdot r_{1} = \frac{1}{2}(\gamma + 1)$$

$$\nabla \lambda_{2} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \implies \nabla \lambda_{2} \cdot r_{2} = 0$$

$$\nabla \lambda_{3} = \begin{bmatrix} \frac{\partial c}{\partial \rho} \\ 1 \\ \frac{\partial c}{\partial \rho} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{c}{2\rho} \\ 1 \\ \frac{c}{2\rho} \end{bmatrix} \implies \nabla \lambda_{3} \cdot r_{3} = \frac{1}{2}(\gamma + 1)$$

$$(17)$$

第二个特征场中的简单波由密度变化组成,它们以恒定的速度 u 平流,因为在这样的波中 u 和 p 必须是恒定的。这种波通常被称为熵波,因为熵满足平流方程:

$$s_t + us_x = 0, (18)$$

如果 p 恒定, 熵随密度变化。

第一支和第三支的简单波会变形,因为 λ_1 和 λ_3 沿着这些波的积分曲线变化,锐化为冲击波或稀有波扩散。

3 实验与结果分析

3.1 初始值设计

对方程

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = 0 \tag{19}$$

在 t=0 时刻有

$$w(x,t)|_{t=0} = \begin{cases} W_L, & x < 0 \\ W_R, & x > 0 \end{cases}$$
 (20)

为和经典数值计算结果比较, 取文献 Harten (1983) 中的值, 即 $\gamma = 1.4$, 和

$$W_L = \begin{bmatrix} 0.445 \\ 0.311 \\ 8.928 \end{bmatrix}, \quad W_R = \begin{bmatrix} 0.5 \\ 0 \\ 1.4275 \end{bmatrix}$$
 (21)

3.2 精确解格式

精确解由附件 Hydrodynamics.xlsx 中提供, 其最终形式为分为五段的分段函数, 具体形式如下

$$\rho = \begin{cases}
0.445, & x < v_1 t \\
(x - v_1 t) \frac{0.345 - 0.445}{v_2 t - v_1 t} + 0.445, & v_1 t < x < v_2 t \\
0.345, & v_2 t < x < v_3 t \\
1.304, & v_3 t < x < v_4 t \\
0.500, & x > v_4 t
\end{cases} (22)$$

$$m = \begin{cases} 0.311, & x < v_1 t \\ (x - v_1 t) \frac{0.527 - 0.311}{v_2 t - v_1 t} + 0.311, & v_1 t < x < v_2 t \\ 0.527, & v_2 t < x < v_3 t \\ 1.994, & v_3 t < x < v_4 t \\ 0.000, & x > v_4 t \end{cases}$$
(23)

$$E = \begin{cases} 8.928, & x < v_1 t \\ (x - v_1 t) \frac{6.570 - 8.928}{v_2 t - v_1 t} + 8.928, & v_1 t < x < v_2 t \\ 6.570, & v_2 t < x < v_3 t \\ 7.691, & v_3 t < x < v_4 t \\ 1.428, & x > v_4 t \end{cases}$$
(24)

其中 $v_1 = -2.633$, $v_2 = -1.636$, $v_3 = 1.529$, $v_4 = 2.480$

3.3 Lax-Wendroff 格式

Lax-Wendroff 格式适用于守恒型方程

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = 0 \tag{25}$$

其中差分格式为

$$u_{j}^{n+1} = u_{j}^{n} - \frac{\Delta t}{2\Delta x} (F_{j+1}^{n} - F_{j-1}^{n}) + \frac{\Delta t^{2}}{2\Delta x^{2}} \left[A_{j+1/2}^{n} (F_{j+1}^{n} - F_{j}^{n}) - A_{j-1/2}^{n} (F_{j}^{n} - F_{j-1}^{n}) \right]$$
(26)

其中 $A = \frac{\partial F}{\partial u}, A$ 的表达式见第 2.1.2 节. 单元边界上的值可以取

$$A_{j\pm 1/2}^n = A(u_{j\pm 1/2}^n), \qquad u_{j\pm 1/2}^n = \frac{1}{2}(u_j^n + u_{j\pm 1}^n)$$
 (27)

3.4 Upwind 格式

Upwind 格式既适用于守恒型方程,也适用于非守恒方程,本实验设计使用非守恒方程

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{B} \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} = 0 \tag{28}$$

差分形式为

$$u_{k,l}^{n+1} = u_{k,l}^{n}$$

$$-\frac{\Delta t}{\Delta x} \sum_{i} \sum_{j} \left\{ \operatorname{sgn}(\lambda_{i,l}^{n}) \lambda_{i,l}^{n} R_{ki,l}^{n} L_{ij,l}^{n} \left[u_{j,l}^{n} - u_{j,l-\operatorname{sgn}(\lambda_{i,l}^{n})}^{n} \right] \right\}$$

$$(29)$$

因为分解特征值之后,其特征值的物理意义为传播的波速,所以其正负号决定了迎风格式的差分方向。

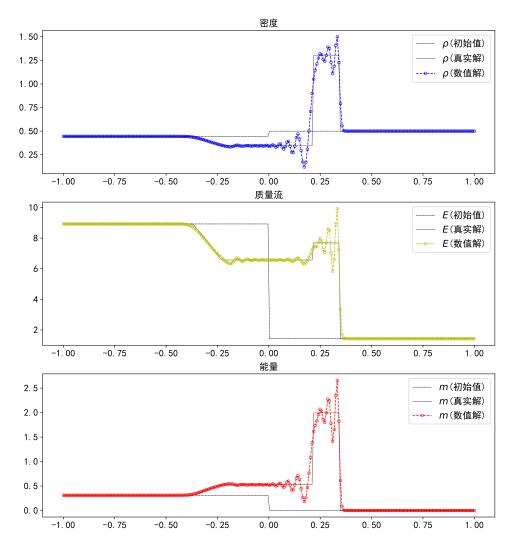


图 1: Lax-Wendroff 格式计算结果, 网格点数为 261. **从上到下分别是密度** ρ , **能量** E **和质量** $\hat{m} = \rho u$. 其中点线是初值, 虚线 (上面的数据点用符号 \circ 标注) 是 t = 0.14 时的数值结果, 实线是对应的真实解.

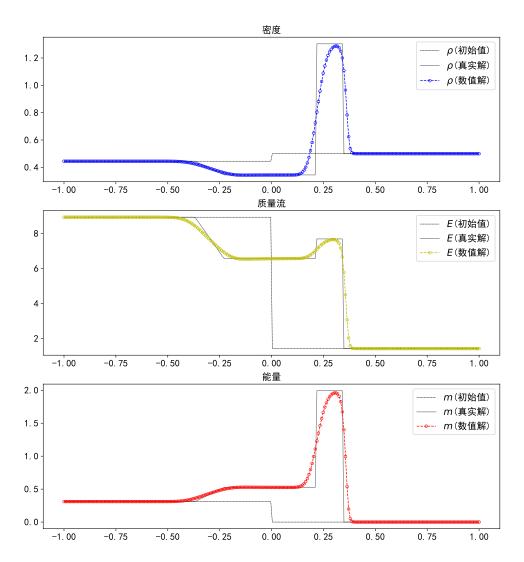


图 2: 迎风格式计算结果, 网格点数为 261. **从上到下分别是密度** ρ , 能量 E 和质量流 $m=\rho u$. 其中点线是初值, 虚线 (上面的数据点用符号。标注) 是 t=0.14 时的数值结果, 实线是对应的真实解.

3.5 TVD 格式

TVD 格式适用于非守恒方程

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{B} \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} = 0 \tag{30}$$

TVD 全称为 Total Variat Diminishing, 即总变差不变或减小, 代表着震荡的剧烈程度减少, 能保证迭代过程中不发散。其中 Minmod 为某一种 TVD 格式, 也是这次实验所采用的方法。 Minmod 差分形式为

$$u_{k,l}^{n+1} = u_{k,l}^{n}$$

$$-\frac{\Delta t}{\Delta x} \sum_{i} \sum_{j} \left\{ \operatorname{sgn}(\lambda_{i,l}^{n}) \lambda_{i,l}^{n} R_{ki,l}^{n} L_{ij,l}^{n} \left[u_{j,l}^{n} - u_{j,l-\operatorname{sgn}(\lambda_{i,l}^{n})}^{n} \right] \right.$$

$$\left. - \frac{1}{2} \operatorname{sgn}(\lambda_{i,l}^{n}) \lambda_{i,l}^{n} R_{ki,l}^{n} L_{ij,l}^{n} \left[\Delta x - \operatorname{sgn}(\lambda_{i,l}^{n}) \lambda_{i,l}^{n} R_{ki,l}^{n} L_{ij,l}^{n} \Delta t \right] \left[\sigma_{j,l}^{n} - \sigma_{j,l-\operatorname{sgn}(\lambda_{i,l}^{n})}^{n} \right] \right\},$$

$$(31)$$

其中

$$\sigma_i^n = \mathtt{Minmod}\left(\frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x}, \frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x}\right), \tag{32}$$

$$\mathtt{Minmod}(a,b) = \begin{cases} a, & \text{if } |a| < |b| & \text{and } ab > 0 \\ b, & \text{if } |a| > |b| & \text{and } ab > 0 \\ 0, & \text{if } ab \leq 0. \end{cases} \tag{33}$$

我们发现由于 TVD 格式较 Upwind 格式而言会出现振荡,导致 ρ 或 p 出现负值,则在 $a = \sqrt{\gamma \rho/p}$ 中根号下出现负值,我们调整 CFL 为 0.05 后进行了模拟,根号下便不再出现负值。

3.6 实验结果分析与对比

高阶精度与数值振荡是无法调和的两个对立面,高阶相容的线性格式必定存在负系数,数 值振荡现象不可避免。

- Lax-Wendroff 的实验格式如图 1 所示,由于有高阶补偿项,所以各物理量高度保持得很好,过渡区间宽度与解析解基本一致,但出现的色散(上冲和下冲),在间断处出现振荡。
- *Upwind* 的实验格式结果如图 2 所示, *Upwind* 格式是一阶相容的,在 CFL 条件下,它们是单调格式,不会出现数值振荡. 故物理量随着波的传播被逐渐抹平,过渡区间宽度较长。
- *TVD* 的实验格式结果如图 3 和图 4 所示,通过要求数值解的总变化不随时间增加,就激波模拟而言 *TVD* 格式比 *UpWind* 格式存在一定的优势。且格点数为 133 的 TVD 格式(图 3) 较格点数为 261 的 TVD 格式(图 4) 间断点处更平滑无棱角。

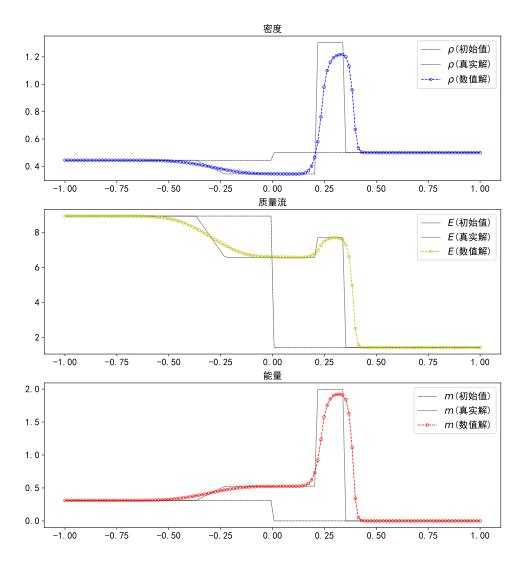


图 3: (van Leer) TVD 格式计算结果, 网格点数为 133. 其他标注同图 2.

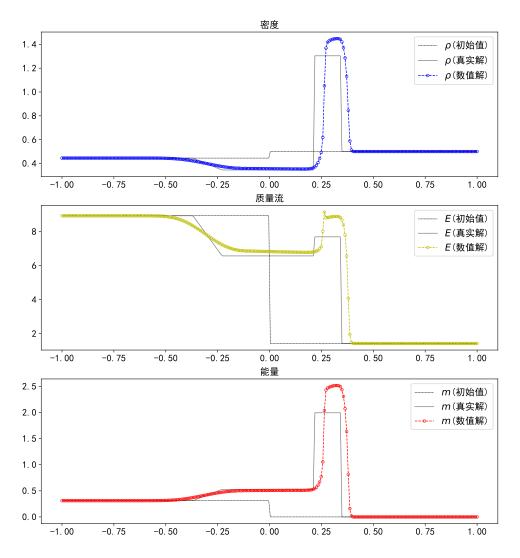


图 4: (van Leer) TVD 格式计算结果, 网格点数为 261. 其他标注同图 2.

4 分工说明

余航编写了代码 main.py 与 run.sh, 徐均益编写了 main.jl, 两人各自独立实现了 Lax-Wendroff 格式, 迎风格式及满足 TVD 的限制器格式。余航完成了文档初稿, 陈宇韬进行了文档编写和校验。

5 附件

- 1. main.tex 本报告 LATEX 文件.
- 2. main.pdf 本报告 PDF 输出文件.
- 3. code/main.jl 徐均益编写的 julia 代码
- 4. code/main.py 和 code/run.sh 分别是余航编写的 python 代码和 bash 运行脚本
- 5. References.bib 文献文件
- 6. figures/upwind261.pdf 迎风格式计算结果, 261 网格.
- 7. figures/limiter133.pdf van Leer TVD 格式计算结果, 133 网格.
- 8. figures/limiter261.pdf van Leer TVD 格式计算结果, 261 网格.
- 9. Hydrodynamics.xlsx 相关问题 Excel 计算表格, 深绿色单元为输入, 可以变更. 其中
 - (a) Riemann 表格中, B2 为 γ 值, B4– B6 和 E4–E6 分别是左侧和右侧的密度, 质量流及能量的初值. A25–A26 迭代用值, A24 为 A25 和 A26 的平均值. 22 行复制 24 行的值. 当 G24, 即 G22 值为零时, 得到此 Riemann 问题的解. N3 为时间值, 密度, 质量流及能量图形的坐标初值和对应比例分别由 N4– N6 和 O4–O6 调节.
 - (b) Hydrodynamics 表格为对应守恒型方程的矩阵特征值, 左右特征向量, 变量在各个波模的分解, 等等. 这些可以用于检查后续高精度格式计算的一些中间结果是否正确.

参考文献

Harten, A. (1983). High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. J. Comput. Phys., 49:357.