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

†ID: SA22214015 Email: jyxu@mail.ustc.edu.cn

‡ID: SA22168021 Email: yh131996@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

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

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

$$m = \rho u, \tag{4}$$

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

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

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

守恒形式下 $\boldsymbol{A}$ 的表达式

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

左右特征向量

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

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

其中

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

2.2 非守恒形式

变量代换后式 (6) 化为

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

其中

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

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) 无法直接化成守恒形式。

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

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

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

波模分解的方程为

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

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

$$\begin{aligned} u_{k,l}^{n+1} =& u_{k,l}^n \\ &- \frac{\Delta t}{\Delta x} \sum_i \sum_j \left\{ \mathrm{sgn}(\lambda_{i,l}^n)\lambda_{i,l}^n R_{ki,l}^n L_{ij,l}^n \left[u_{j,l}^n - u_{j,l-\mathrm{sgn}(\lambda_{i,l}^n)}^n \right] \right\} \end{aligned} \tag{15}$$

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

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= u - a, & \lambda_2 &= u, \quad \lambda_3 = u + a, \\ r_1 &= \begin{bmatrix} -\rho/a \\ 1 \\ -\rho a \end{bmatrix}, & r_2 &= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad r_3 = \begin{bmatrix} \rho/a \\ 1 \\ -\rho a \end{bmatrix}, \end{aligned} \tag{16}$$

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：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\nabla}\lambda_1 &= \begin{bmatrix} -\,\partial c/\partial\rho \\ 1 \\ -\,\partial c/\partial\rho \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c/2\rho \\ 1 \\ -c/2\rho \end{bmatrix} \implies \boldsymbol{\nabla}\lambda_1 \cdot r_1 = \frac{1}{2}(\gamma+1) \\ \boldsymbol{\nabla}\lambda_2 &= \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \implies \boldsymbol{\nabla}\lambda_2 \cdot r_2 = 0 \\ \boldsymbol{\nabla}\lambda_3 &= \begin{bmatrix} \partial c/\partial\rho \\ 1 \\ \partial c/\partial\rho \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -c/2\rho \\ 1 \\ c/2\rho \end{bmatrix} \implies \boldsymbol{\nabla}\lambda_3 \cdot r_3 = \frac{1}{2}(\gamma+1) \end{aligned} \tag{17}$$

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:

$$s_t + u s_x = 0, \tag{18}$$

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

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

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

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

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

$$\rho=\begin{cases} 0.445, & x<v_1t \\ (x-v_1t)\dfrac{0.345-0.445}{v_2t-v_1t}+0.445, & v_1t<x<v_2t \\ 0.345, & v_2t<x<v_3t \\ 1.304, & v_3t<x<v_4t \\ 0.500, & x>v_4t \end{cases} \tag{22}$$

$$m=\begin{cases} 0.311, & x<v_1t \\ (x-v_1t)\dfrac{0.527-0.311}{v_2t-v_1t}+0.311, & v_1t<x<v_2t \\ 0.527, & v_2t<x<v_3t \\ 1.994, & v_3t<x<v_4t \\ 0.000, & x>v_4t \end{cases} \tag{23}$$

$$E=\begin{cases}8.928, & x<v_1t\\ (x-v_1t)\dfrac{6.570-8.928}{v_2t-v_1t}+8.928, & v_1t<x<v_2t\\ 6.570, & v_2t<x<v_3t\\ 7.691, & v_3t<x<v_4t\\ 1.428, & x>v_4t\end{cases}\tag{24}$$

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

$$\begin{aligned}u_j^{n+1}=&u_j^n-\frac{\Delta t}{2\Delta x}(F_{j+1}^n-F_{j-1}^n)\\&+\frac{\Delta t^2}{2\Delta x^2}\left[A_{j+1/2}^n(F_{j+1}^n-F_j^n)-A_{j-1/2}^n(F_j^n-F_{j-1}^n)\right]\end{aligned}\tag{26}$$

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

$$A_{j\pm1/2}^n=A(u_{j\pm1/2}^n),\qquad u_{j\pm1/2}^n=\frac{1}{2}(u_j^n+u_{j\pm1}^n)\tag{27}$$

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

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

差分形式为

$$\begin{aligned}u_{k,l}^{n+1}=&u_{k,l}^n\\&-\frac{\Delta t}{\Delta x}\sum_i\sum_j\left\{\mathrm{sgn}(\lambda_{i,l}^n)\lambda_{i,l}^nR_{ki,l}^nL_{ij,l}^n\left[u_{j,l}^n-u_{j,l-\mathrm{sgn}(\lambda_{i,l}^n)}^n\right]\right\}\end{aligned}\tag{29}$$

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。

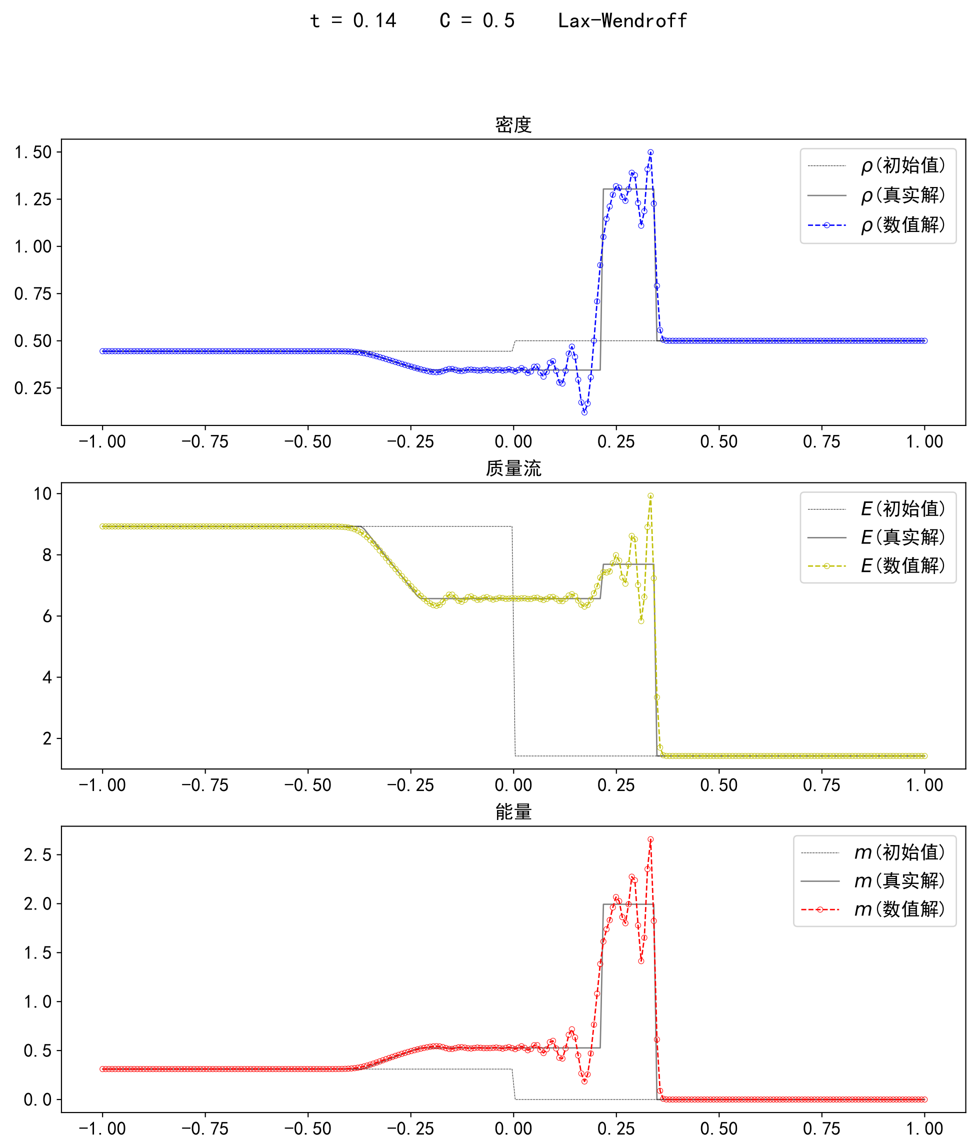

图 1: Lax-Wendroff 格式计算结果, 网格点数为 261. **从上到下分别是密度 ρ, 能量 E 和质量流 $m = \rho u$.** 其中点线是初值, 虚线 (上面的数据点用符号 $\circ$ 标注) 是 $t = 0.14$ 时的数值结果, 实线是对应的真实解.

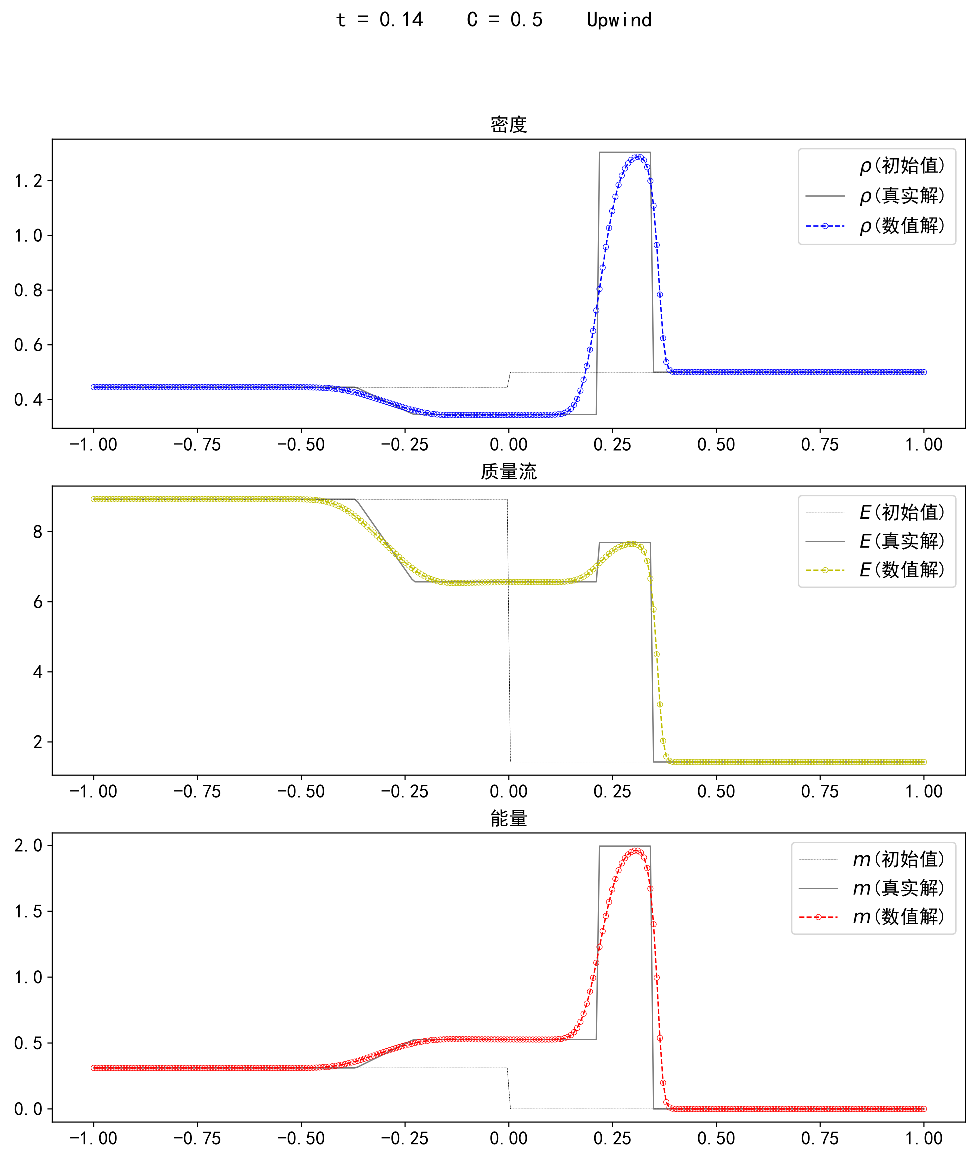

图 2: 迎风格式计算结果, 网格点数为 261. **从上到下分别是密度** ρ**, 能量** E **和质量流** $m = \rho u$**.** 其中点线是初值, 虚线 (上面的数据点用符号 $\circ$ 标注) 是 $t = 0.14$ 时的数值结果, 实线是对应的真实解.

3.5 *TVD* 格式

TVD 格式适用于非守恒方程

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

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

$$\begin{aligned} u_{k,l}^{n+1} &= u_{k,l}^{n} \\ &\quad - \frac{\Delta t}{\Delta x} \sum_i \sum_j \Bigg\{ \operatorname{sgn}(\lambda_{i,l}^n) \lambda_{i,l}^n R_{ki,l}^n L_{ij,l}^n \left[u_{j,l}^n - u_{j,l-\operatorname{sgn}(\lambda_{i,l}^n)}^n \right] \\ &\quad + \frac{1}{2} \operatorname{sgn}(\lambda_{i,l}^n) \lambda_{i,l}^n R_{ki,l}^n L_{ij,l}^n \left[\Delta x - \operatorname{sgn}(\lambda_{i,l}^n) \lambda_{i,l}^n R_{ki,l}^n L_{ij,l}^n \Delta t \right] \left[\sigma_{j,l}^n - \sigma_{j,l-\operatorname{sgn}(\lambda_{i,l}^n)}^n \right] \Bigg\}, \end{aligned} \tag{31}$$

其中

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

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

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。

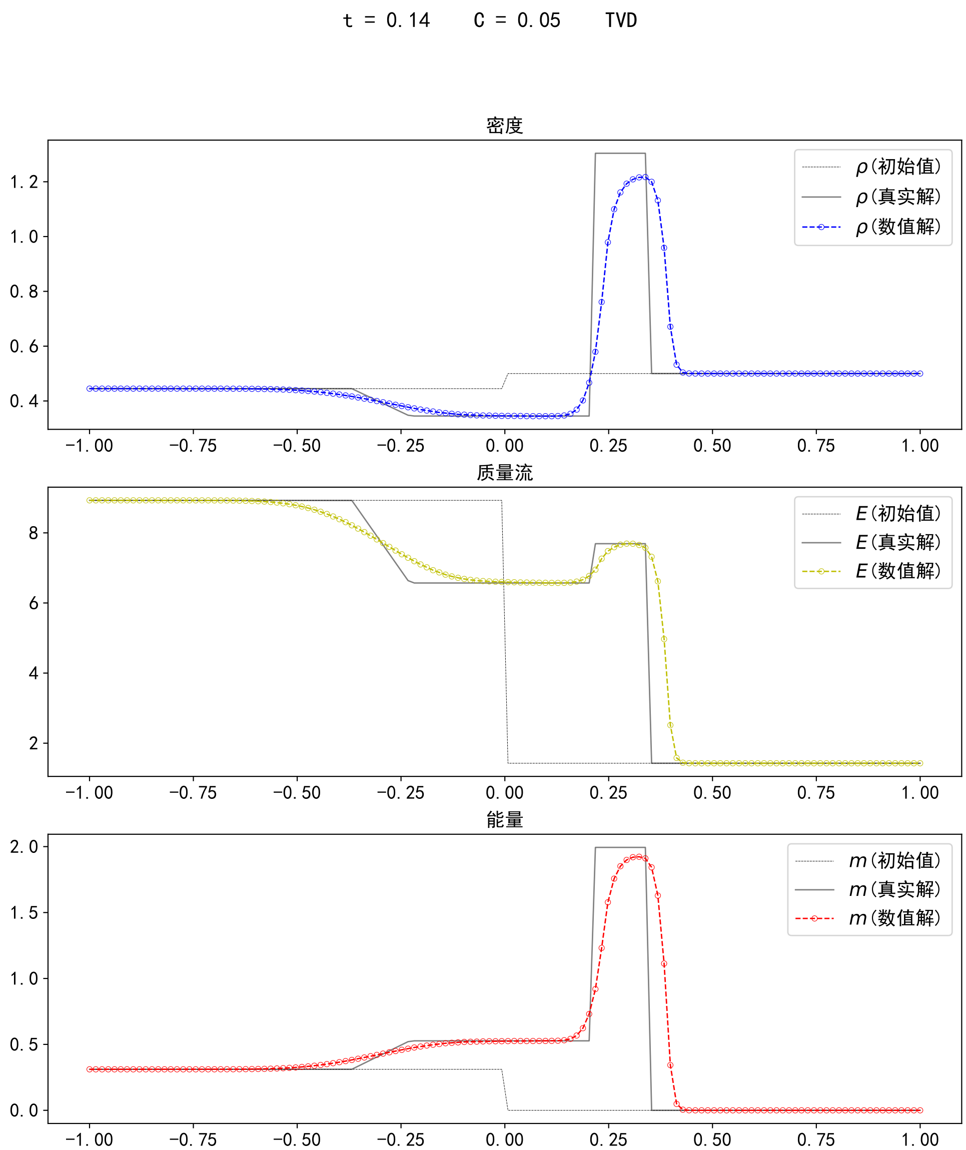

图 3: (van Leer) TVD 格式计算结果, 网格点数为 133. 其他标注同图 2.

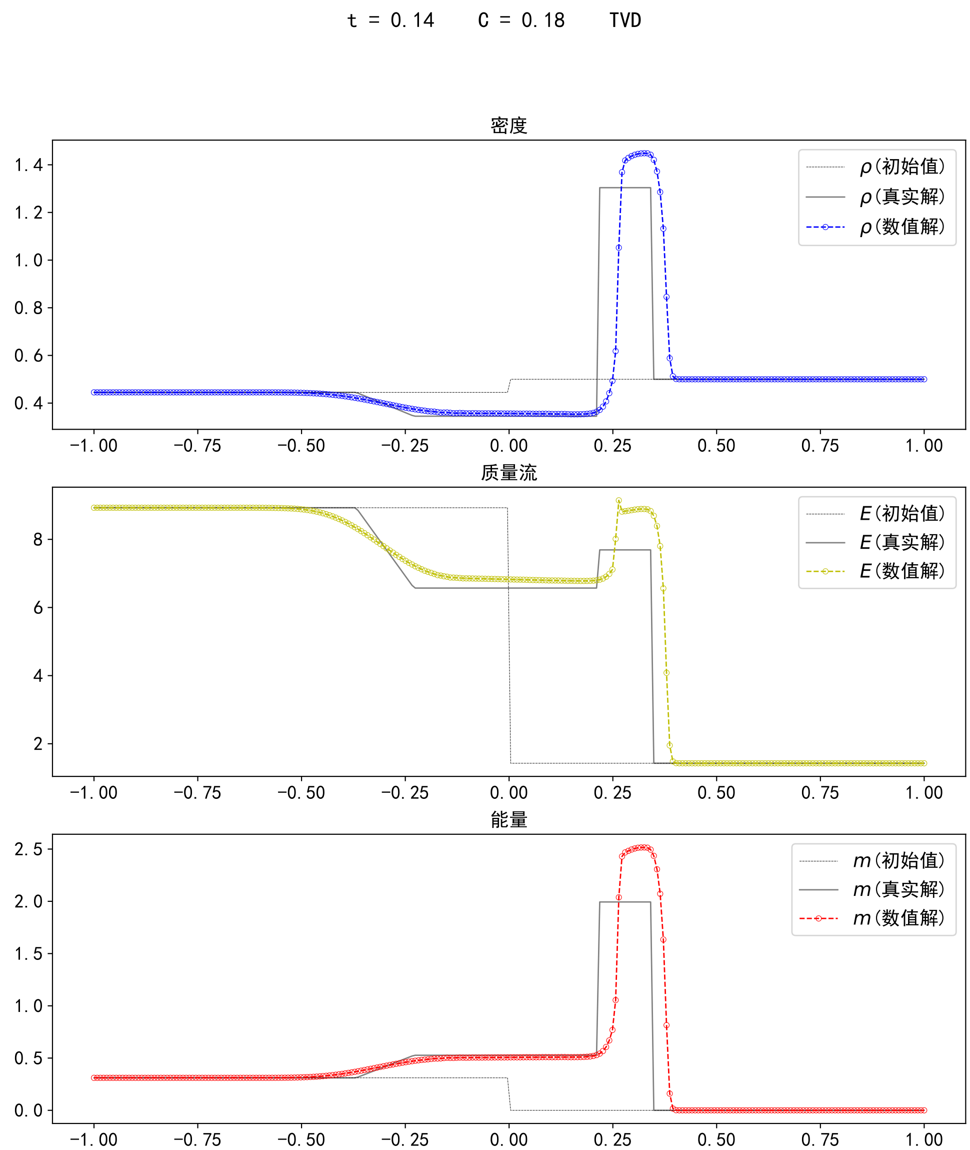

图 4: (van Leer) TVD 格式计算结果, 网格点数为 261. 其他标注同图 2.

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.