

密级 _____



中国科学院大学
University of Chinese Academy of Sciences

博士学位论文

可压缩流动中间断问题的高分辨率数值求解方法及应用

作者姓名 _____ 刘利

指导教师 _____ 申义庆 研究员

_____ 中国科学院力学研究所

学位类别 _____ 理学博士

学科专业 _____ 流体力学

培养单位 _____ 中国科学院力学研究所

2017 年 4 月

Typeset by L^AT_EX 2_ε at September 15, 2017

With package **CAStthesis** v0.2 of C_TE_X.ORG

A Study of High-Resolution Algorithms
for Discontinuous Problems in Complex
Compressible Flows and Their Applications

By
Li Liu

A Dissertation Submitted to
University of Chinese Academy of Sciences
In partial fulfillment of the requirement
For the degree of
Doctor of Fluid Mechanics

Institute of Mechanics
University of Chinese Academy of Sciences

April, 2017

摘要

在计算流体力学研究中，各种间断问题的高分辨率数值求解方法一直是一个重要的课题。如超声速、高超声速流动中的激波，高速化学反应流动中的爆轰波，多相物质间的界面等的存在，都给数值模拟研究带来各种不同的挑战。本文正是针对求解这些问题时遇到的一些困难，发展了相关的数值求解方法。

- (1) 激波是可压缩流动中的一个重要现象。激波捕捉经历了半个多世纪的发展，在近年来，WENO 格式由于既能捕捉激波，在光滑区有具有一致高阶的精度而得到越来越多的应用。但是，已有的一些 WENO 格式主要是针对极值点格式精度降低的问题来进一步发展性能更好的 WENO 格式，如 WENO-M，WENO-Z 等格式。本文中，我们针对 WENO 格式在过渡点所表现出的不足，提出多步加权思想及多步加权（Multistep WENO）格式，有效提高了 WENO 在激波附近的计算精度。除此之外，对某些问题，如湍流的计算，光滑区域需要更高的精度来分辨高频短波，构造杂交格式是一个兼顾激波捕捉和高精度低耗散的有效手段。对于杂交格式，如何有效识别间断是关键问题，文中对比了现存的不同激波识别方法，得出基于 τ_5 系数的 SZ 识别方法最为有效。我们还将有限紧致格式应用在更复杂的方程系统——理想磁流体（MHD）方程求解中。
- (2) 界面是性质不同于激波的另一类的间断问题，界面广泛的存在于如燃烧室混合、射流等流动中。除了传统的无厚度的界面以外，我们往往还需要处理超过三相以上的多相界面和存在一定界面厚度的耗散界面，耗散界面产生的原因包括不可忽略的相间扩散、相变和化学反应等。考虑到常用的界面方法，如 Level-Set 方法，VOF 方法等在守恒性方面和非传统型界面推广中的困难，我们提出一种新型的粒子类界面方法——双信息保存（DIP）方法。该方法的主要思想是：在 Euler 单元内引入两类 Lagrange 信息点，一类限制在单元内移动，称为单元信息点，用来传信息点和单元间信息，另外一类全域追踪，称为粒子信息点，用来修正单元点更新过程中引入的误差。新的方法直接求解对流方程本身，可以很好的模拟各类界面问题。
- (3) 在高速化学反应流动中，爆轰波是最常见的物理现象之一，爆轰波由诱导激

波和化学反应区域构成，而化学反应是一类耗散界面问题，因此爆轰波是结合了激波和界面两类间断类型的间断问题。在爆轰波模拟中，由于反应和流动的尺度差距，如果采用简单的化学反应模型，经常会存在空间刚性问题。采用激波捕捉格式对爆轰波进行模拟时，由于反应区的数值耗散会导致源项错误的激发，可能会得到错误的爆轰波波速和非物理的结果。本文，我们将 DIP 方法应用在组分对流方程求解中，将反应区当成耗散界面进行捕捉，能有效避免空间刚性问题。另外，本文还将 DIP 方法推广到采用基元反应模型的更精细的爆轰反应求解中。数值实验表明，新的求解方法可以有效保持总组分的守恒性，避免爆轰波波前和波后组分的振荡，在总的精度方面相比于传统的求解方法同样有所很大的提高。

- (4) 本文还针对高速化学反应流动的时间刚性问题，基于数值摄动的思想，发展了常微分方程 (ODE) 求解的高精度、刚性稳定、具有显形式的数值摄动 (NP) 格式，并将其应用在刚性化学反应流及采用了基元反应模型的爆轰波数值模拟中，达到避免迭代，提高计算效率的目的。

关键词： 激波捕捉格式，多步加权 WENO 格式，双信息保存方法，数值摄动方法，刚性化学反应流动

Abstract

The numerical studies of the discontinuous problems are always one of the most important topics in the CFD field. Different challenges come from those discontinuities, such as, the shocks in the supersonic and hypersonic flows, the interfaces in the multi-component flows and the detonation wave in the high speed reaction flows. The goal of this paper is to develop corresponding numerical methods to cue some problems in simulating different types of discontinuities.

Shock is one of the main characters in the compressible flows, although the shock-capture methods have developed for nearly half a century, it is still a dramatic topic. Recent years, the weighted essentially non-oscillatory (WENO) schemes have been widely used, as those schemes can capture the shocks stably and get high-order accuracy in the smooth regions. However, the existing modified schemes such as WENO-Z and WENO-M, are all constructed to obtain the optimal order at critical points, but those method cannot obtain the optimal accuracy at the transition points, which connect a smooth region and a discontinuity. A new multi-step method is developed and a new fifth-order WENO scheme is constructed to improve the accuracy at transition points. Besides, in some problems, such as compressible turbulence flows, higher order accuracy is needed in the smooth reagon to resolve the high frequency waves. Hybrid scheme is an ideal idea to obtain both the advantages of shock-capturing and low dissipation in the smooth reagions. The key of the hybrid method is how accuracy can we detect the shocks. In this paper, we compare different existing shock detectors, and get the result that the SZ detector is the most exact one. Furthermore, one kind of hybrid scheme with the use of SZ detector—finite compact scheme is extended to solve the ideal magnetohydrodynamics (MHD) equations in this paper.

Interface is another kind of discontinuity which appears in the compressible multi-components flows, such as in the mixing of the combustion chamber and jet-flows. Besides the traditional two-phases interface, in some problems we

also need to solve the interface with more than three phases or with the diffusive interface model. The diffusive interface is used when the thickness of the interface region can not be ignored such as in the cases with diffusion, phase changing or chemical reaction. Considering that, the existed interface methods such as Level-set method and VOF method are all have problems when used in the diffusive interface, in this paper, a new Euler-Lagrange method — dual information preserving (DIP) method is constructed, In the DIP method, two kinds of Lagrangian points are introduced into the Eulerian mesh, one kind of points is limited in every cell called cell-point to transmit the information between the Eulerian cells and the Lagrangian points. Another kind of point named as particle-point is traced in the whole computation to keep the accuracy and sharp outline of the surface by correcting the information of the cell-points every time step. The new method can be used in the problems with traditional interface, multi-phases interface or diffusive interface.

In the high speed reacting flows, the detonation wave is a combination phenomenon of the shock and the reaction which can be treated as one kind of diffusive interface. With a simple reaction model, the difference in the scales between the reaction and convection may cause huge spatial stiff problems. Without a suitable method, a wrong detonation speed or unphysical wave structure may appear in the result. As the DIP method can compute the diffusive interface, in this paper, DIP method is used to restrict the incorrect reaction activation caused by the numerical dissipation in the mass fraction terms. We also develop the new method to the reacting flows with elementary reaction model. With the new method, the results also show significantly improvment in the conservation of components, stability near the discontinuities and the accuracy.

In this paper, we also construct a high-order numerical perturbation (NP) method to the ordinary difference equation(ODE). Anylysis and numerical tests show the new method is stable with stiff ODE problems. This method is also applied in solving the reaction Euler equations.

Keywords: shock-capturing scheme, interface tracking method, chemical reacting flow, numerical perturbation

目录

摘要 i

Abstract iii

目录 v

第一章 引言 1

 1.1 本文研究的范围及其方程系统 1

 1.1.1 二维 Euler 方程 2

 1.1.2 理想磁流体方程 3

 1.1.3 高速化学反应 Euler 方程 5

 1.2 可压缩流中断断问题的理论研究简介 8

 1.2.1 Euler 方程弱解及解存在性的研究 9

 1.2.2 黎曼问题和 Euler 方程近似解 10

 1.3 计算流体力学和数值方法发展 11

 1.3.1 计算流体力学简介 12

 1.3.2 数值方法的发展 12

 1.4 间断问题数值研究现状和不足 18

 1.4.1 激波捕捉格式和激波分辨率 18

 1.4.2 物质界面和界面追踪方法 18

 1.4.3 气相爆轰波 21

 1.5 本文所开展研究内容 29

上部分	31
下部分	35
第二章 双信息保存 (DIP) 方法	39
2.1 不同的界面类型和界面方法	39
2.1.1 传统界面	39
2.1.2 多相界面和耗散界面	40
2.2 双信息保存方法基本思想	41
2.2.1 信息点的概念	41
2.2.2 单元信息点 (单元点)	43
2.2.3 粒子信息点 (粒子点)	48
2.2.4 边界处理	50
2.2.5 DIP 方法一维伪代码	52
2.2.6 二维 DIP 方法	54
2.3 数值算例	55
2.3.1 一维数值算例	55
2.3.2 二维数值算例	58
2.4 小结	63
第三章 刚性常微分方程和数值摄动 (NP) 方法	65
3.1 刚性常微分 (ODE) 方程	65
3.2 数值摄动 (NP) 方法	66
3.3 NP 格式的稳定性分析	68
3.4 不同格式的数值比较	70
3.5 小结	72
Appendix A 化学反应中相关尺度的探讨	75
A.1 化学反应时间尺度分析方程和空间尺度分析方程	75
A.2 尺度分析 [234]	77

Appendix B 二维 DIP 方法伪代码	79
Appendix C 化学反应不同组分热力学拟合参数	83
参考文献	85

表格

3.1 不同 ODE 格式精度分析.....	73
C.1 不同 ODE 格式精度分析.....	84

插图

1.1	典型爆轰波压力曲线 [262]	22
1.2	二维胞格结构示意图 [262]。	23
1.3	一个典型的爆轰波虚假传播计算结果 [305]	26
1.4	$2H_2 + O_2 + 7Ar$ 反应组分摩尔比变化和激波前沿距离间关系 [234]	28
1.5	$2H_2 + O_2 + 7Ar$ 反应不同特征值空间尺度和激波前沿距离间关系 [234]	28
2.1	界面的一维示意图	40
2.2	不同界面方法一维示意图	41
2.3	不同类型界面方法适合求解的工况二维示意图	42
2.4	多相界面和耗散界面一维示意图	42
2.5	信息点和网格节点类比一维示意图	43
2.6	单元信息点一维示意图	44
2.7	界面在单元点间可能的分布情况一维示意图	46
2.8	无厚度界面情况中单元点的消去方法一维示意图	46
2.9	单元点的回溯生成法一维示意图	47
2.10	耗散界面情况中单元点的消去方法一维示意图	48
2.11	耗散界面问题中单元点的生成方法一维示意图	48
2.12	边界和虚拟网格一维示意图	50
2.13	一维线性对流间断传播算例, 均匀速度场 $u = 1$, 时间步 $Nt = 23$	56
2.14	一维对流方程组合波算例, 不同计算方法计算结果比较, 均匀速度场 $u = 1$, $T = 6$	57
2.15	Burgers 方程算例, $T = 0.4$	58
2.16	二维均匀速度场算例, $T = 0.6$	59

2.17 Zalesak 圆盘旋转算例, $N = 200 \times 200$ 网格下计算结果 ($T_1 = 0$, $T_2 = 0.25$, $T_3 = 0.5$, $T_4 = 0.75$, $T_5 = 1$ 和 $T_6 = 20$), 其中黑线为 初始条件	60
2.18 界面拉伸算例, $N = 200 \times 200$, 其中黑线为参考解	61
2.19 多相界面拉伸算例, $N = 400 \times 400$	62
2.20 多相界面旋转算例, $N = 400 \times 400$	63
3.1 不同格式在 h 复平面上稳定区域	71
3.2 不同格式求解 ODE 方程 (3.22) 结果. 参考解为采用 $N = 3000$ 网格得到	72

第一章 引言

间断问题是计算流体力学中，乃至整个计算数学中长久存在的难点。在数学上，间断问题体现为，对流方程不存在无限可微的经典解而只能在广义函数空间寻求弱解。弱解是普遍存在的，对于几乎所有连续力学模型都遵循的非线性双曲守恒方程的初值问题 (Cauchy 问题) 来说，即使初始值是光滑的，解在有限时间内也会发展出奇异性 [239,270,344]。从物理角度上看，间断体现为某些物理量在空间上的不连续性。流体力学中的间断问题主要包括激波和接触间断（界面）两种类型。

激波在可压缩流体中就像衣服上的褶皱一样随处可见，是可压缩流中最主要的一类间断，所有和可压缩流动有关的问题都躲不开激波。在物理上，激波成因已经得到了充分的研究 [207,220]，然而更复杂的激波间或是激波与其他结构如激波/边界层、激波/界面间的相互作用等仍是当今理论研究 [15,133,212,337]、实验研究 [6,202,291] 和数值模拟 [115,311,313] 的热点，有很强的工程背景。

在流体中，当某位置压强存在间断时，根据特征线是汇聚的还是发散的，会相应形成激波或者稀疏波；当压力连续而密度或状态参数存在间断时，就会出现接触间断或界面 [341]。事实上界面和接触间断是同一类型的间断问题 [55]，因此接触间断也被称为接触界面 [8,285]。通过界面，压力连续而密度或物质状态参数存在间断。界面问题集中体现在多介质流体的研究中，是最关键问题。多相流在高速可压缩流动中同样有广泛应用 [37]，如空化 [24,119,319]、化学反应流动 [170] 和热核反应 [161] 等多个方面。

激波和界面并非独立存在的。在化学反应流中，激波和反应界面相互作用会形成爆轰波 [189,203,244]。爆轰波 [95,103,171] 的数值研究是一大前沿问题，在诸如发动机 [40,41]、高能炸药爆炸 [51,79,171] 等诸多领域均有重要应用。

1.1 本文研究的范围及其方程系统

本文将从数值方法角度对高速可压缩流中的各类间断问题进行较为系统的研究，其中包括先进的激波捕捉格式和激波识别方法、高精度低耗散的杂交格式及其在磁流体中的应用、界面方法和刚性化学反应流及爆轰波相关研究等。

本文研究涉及三种物质状态，分别为可压缩理想气体、理想磁流体和存在化学反应的可压缩多组分气体混合物，下面分别给出具体的控制方程系统。

1.1.1 二维 Euler 方程

研究各种常见可压缩流动问题时，我们常采用无黏、无导热的 Euler 方程，它是 Navier-Stokes(NS) 方程的简化方程，既是 NS 方程分层次求解的一层，也能满足很多物理问题的求解要求，同时，Euler 方程研究也是其它如磁流体及化学反应流等复杂方程系统研究的基础。下面给出二维守恒型 Euler 方程：

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} = 0 \quad (1.1)$$

其中

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \end{pmatrix}, \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(E + p) \end{pmatrix}, \mathbf{G} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ v(E + p) \end{pmatrix}$$

其中 ρ 为密度， u 为 x 方向速度， v 为 y 方向速度， p 是流体的压力， E 是总能量，对于理想气体有如下形式状态方程

$$p = (\gamma - 1)[E - \frac{1}{2}\rho(u^2 + v^2)] \quad (1.2)$$

其中 γ 为比热比。

虽然 Euler 方程形式较 NS 方程大大简化，但是采用 Euler 方程至少有四点实际意义：

1. 可以认为 Euler 方程是 NS 方程在大雷诺数下的一种特例情况 [354]。
2. 在气体动力学中，求解无分离流动问题时，将无黏流动理论和边界层理论结合，可以很好解决这类工程问题。
3. 很多流动现象的机理研究都可以采用 Euler 方程，由于系统简单，更容易分析和研究。

4. 由于 Euler 方程是 NS 方程的对流部分，数值上对流部分的方法设计更为困难，通常在 Euler 方程上设计算法，然后推广应用在 NS 方程中。

基于这些考虑，针对我们要研究的方法和问题来说，本文的控制方程主要采用 Euler 方程。

1.1.2 理想磁流体方程

磁流体 (MHD) 在气体动力学中主要出现在如飞行器再入、燃烧室等存在等离子体的超高温情况中。理想磁流体方程是磁流体研究中最简单的模型方程，它和 Euler 方程有类似的波动结构，但是它同时具有非严格的双曲性质、更复杂的特征值系统和流场结构。本文并不深入研究磁流体，只将 Euler 的数值方法推广于理想 MHD 方程求解中，验证方法的适用性。下面给出三维理想磁流体控制方程：

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial z} = 0 \quad (1.3)$$

其中

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ E \\ B_x \\ B_y \\ B_z \end{pmatrix}, \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p_t - B_x^2 \\ \rho uv - B_x B_y \\ \rho uw - B_x B_z \\ (E + p_t)u - B_x(uB_x + vB_y) \\ 0 \\ uB_y - vB_x \\ uB_z - wB_x \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv - B_y B_x \\ \rho v^2 + p_t - B_y^2 \\ \rho vw - B_y B_w \\ (E + p_t)v - B_y(uB_x + vB_y) \\ vB_x - uB_y \\ 0 \\ vB_z - wB_y \end{pmatrix}, \mathbf{H} = \begin{pmatrix} \rho w \\ \rho uw - B_z B_x \\ \rho vw - B_z B_y \\ \rho w^2 + p_t - B_z^2 \\ (E + p_t)w - B_z(uB_x + vB_y + wB_z) \\ wB_x - uB_z \\ wB_y - vB_z \\ 0 \end{pmatrix}$$

和 $p_t = p + (B_x^2 + B_y^2 + B_z^2)/2$, 其中 \mathbf{B} 为磁场强度, \mathbf{E} 为电场强度, 对于磁场有限制条件

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (1.4)$$

能量方程为

$$p = (\gamma - 1)[E - \frac{1}{2}\rho(u^2 + v^2) - \frac{1}{2}(B_x^2 + B_y^2 + B_z^2)]$$

理想磁流体方程将流体看成完美的导体，具有无限大的电导率，并且忽略了位移电流。该方程是模拟磁流体最简化的自洽系统，多用在研究等离子体的宏观稳定性和平衡性等方面，尤其在磁约束核聚变中，该方程有重要应用 [96]。

理想磁流体方程 (1.3) 和 Euler 方程 (1.1) 相比，增加了前麦克斯韦 (Pre-Maxwell) 方程 [204]，对于一维来说特征根从 3 个增加到 7 个，从小到大分别为

$$\lambda_{1,2,3,4,5,6,7} = u - c_f, u - c_a, u - c_s, u, u + c_s, u + c_a, u + c_f$$

可见从原本一个声速量增加到了三个，分别可以称为快波，中速波 (Alfvén) 和慢波。Alfvén 波为

$$c_a = \frac{|B_x|}{\sqrt{\rho}}$$

快波和慢波为

$$c_{f,s} = \sqrt{\frac{1}{2} \left[c^2 + b^2 \pm \sqrt{(c^2 + b^2)^2 - 4c^2 c_a^2} \right]}$$

其中 c 为声速， $b^2 = \frac{B_x^2 + B_y^2 + B_z^2}{\rho}$ 。

对于一维方程系统来说，如果任意 u 的特征根都不相同，则认为该双曲系统为严格的双曲系统 [247]，而方程 (1.3) 中，三个波速在特殊情况下可能等值，因此该系统为非严格双曲 (non-strictly hyperbolic) 系统 [69, 241, 247]。

由于理想磁流体中波速更多、特征值系统更为复杂以及其非严格双曲的特性都为数值方法的构造带来很多困难，流场中更为丰富的激波结构也对数值方法的稳定性提出考验。由于方程相似，很多 Euler 方程求解方法都曾推广到理想磁流体方程研究中。限于主题，本文并不对该方程系统做深入研究，只将构造的数值方法做初步推广和验证工作。

1.1.3 高速化学反应 Euler 方程

在化学反应流动中，激波会带来新的物理问题，如爆燃和爆轰。爆燃波和爆轰波是化学反应流中具有代表性的间断结构，它们的相关理论、实验以及数值研究在极多的高温、高超气体动力学领域中有重要意义。本文采用如下的无粘、无传热的 Euler 反应方程系统

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} = \mathbf{S} \quad (1.5)$$

其中

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \\ \rho z_1 \\ \rho z_2 \\ \vdots \\ \rho z_{ns-1} \end{pmatrix}, \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(E + p) \\ \rho z_1 u \\ \rho z_2 u \\ \vdots \\ \rho z_{ns-1} u \end{pmatrix}, \mathbf{G} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ v(E + p) \\ \rho z_1 v \\ \rho z_2 v \\ \vdots \\ \rho z_{ns-1} v \end{pmatrix}, \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \omega_1 \\ \omega_2 \\ \vdots \\ \omega_{ns-1} \end{pmatrix}$$

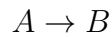
其中 ns 为多组分流体中的组分数， z_i 和 ω_i 分别为 i 组分质量分数和生成率。由于总的质量分数为 1，则第 ns 组分为

$$z_{ns} = 1 - \sum_{i=1}^{ns-1} z_i$$

不同的反应模型下生成率有不同形式，本文主要采用三种形式，从简单到复杂分别为固定比热比的单步总包反应模型，固定比热比的多步反应模型和变比热比的基元反应模型。

固定比热比单步总包反应模型

对于固定比热比的单步总包反应模型



其中 A 代表反应物, B 代表生成物, 反应源项为

$$\omega_1 = -K(T)\rho z \quad (1.6)$$

其中 K 为反应率可以通过如下的 Arrhenius 模型求得

$$K(T) = K_0 e^{-T_{ign}/T} \quad (1.7)$$

或者如下的 Heaviside 模型求得

$$K(T) = \begin{cases} 1/\epsilon, & T \geq T_{ign} \\ 0, & T < T_{ign} \end{cases} \quad (1.8)$$

其中 K_0 是反应率常数, T_{ign} 是燃点和 ϵ 是反应时间。能量方程为

$$p = (\gamma - 1) \left(E - \frac{1}{2}\rho(u^2 + v^2) - \frac{1}{2}\rho u^2 - q_0 \rho z \right)$$

其中 q_0 为反应热。

固定比热比多步反应模型

对于固定比热比多步反应模型, 考虑有 ns 组分的可逆反应

$$\sum_{i=1}^{ns} \mu'_{i,j} \chi_i \leftrightarrow \sum_{i=1}^{ns} \mu''_{i,j} \chi_i \quad (j = 1, \dots, nr) \quad (1.9)$$

其中 nr 为反应方程数, 化学计量数 μ 为整数, χ_i 代表第 i 组分, 上标 ' 为正方向反应化学计量数, " 代表逆方向反应化学计量数。 i 组分反应率可以写成

$$\omega_i = W_i \sum_{k=1}^{nr} (\mu''_{i,k} - \mu'_{i,k}) K_k \prod_j^{ns} \left(\frac{\rho z_j}{W_j} \right)^{\mu'_{j,k}} \quad (1.10)$$

其中 nr 为反应数, W_i 为 i 组分的摩尔质量, 反应率 K_i 采用 Heaviside 形式

$$K_i(T) = \begin{cases} 1/\epsilon_i, & T \geq T_{ign} \\ 0, & T < T_{ign} \end{cases} \quad i = 1, 2, \dots, nr$$

状态方程为

$$p = (\gamma - 1) \left(E - \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2) - \frac{1}{2} \rho u^2 - q_1 \rho z_1 - q_2 \rho z_2 - \cdots - q_{ns} \rho z_{ns} \right) \quad (1.11)$$

其中 q_i 为第 i 组分反应热。

多步基元反应模型

根据物理问题不同和对计算精准度要求不同, 模拟可能需要了解详细的化学反应动力学过程, 基元反应模型就是针对这样的要求提出的, 这里的基元反应就是指反应物微粒 (原子、分子、离子和自由基等) 一步实现的化学变化。区别于多步简化模型, 基元反应模型中的混合物各种热力学参数如焓、熵和比热比等会随着温度变化而改变。基元反应模型研究的气体对象为理想气体方程控制下的热完全气体 ($T < 4000K$)。关于量热完全气体 (Calorically perfect/Perfect)、热完全气体 (Thermally perfect/Semi-perfect)、理想气体 (Ideal) 和真实气体 (Imperfect) 的详细概念可以参照 [7]。

我们同样可以采用公式 (1.9) 来代表所有基元反应, 其中 ns 代表所有反应物和三体的数目。第 i 组分的质量生成率为

$$\omega_i = W_i \sum_{k=1}^{nr} (\nu''_{k,i} - \nu'_{k,i}) \left\{ K_{f,k}(T) \prod_{j=1}^{ns} \gamma_j^{\nu'_{b,k}} - K_{b,j}(T) \prod_{j=1}^{ns} \gamma_j^{\nu''_{k,j}} \right\} \quad (1.12)$$

其中, $K_{f,k}$ 、 $K_{b,k}$ 分别为第 k 个反应的正向和逆向反应速率常数, 可以通过 Arrhenius 公式求得

$$K_{f,k} = A_k T^{b_k} \exp \left(-\frac{E_{a,k}}{R_u T} \right) \quad (1.13)$$

参数 A_k, b_k 和 $E_{a,k}$ 分别为第 k 个基元反应的指前因子、温度系数和活化能。逆反应速率常数 $K_{b,k}$ 可以通过下面方式求得

$$K_{b,k} = \frac{K_{f,k}}{K_{c,k}}, K_{c,k} = K_{p,k} \left(\frac{p_{\text{atm}}}{R_u T} \right)^{\sum_{i=1}^{ns} (\nu''_{i,k} - \nu'_{i,k})} \quad (1.14)$$

其中, p_{atm} 为标准大气压, $K_{p,k}$ 为压力平衡常数

$$K_{p,k} = \exp \left(\sum_{i=1}^{ns} (\nu''_{i,k} - \nu'_{i,k}) \left(\frac{S_i}{R_u} - \frac{H_i}{R_u T} \right) \right) \quad (1.15)$$

S_k 和 H_k 为 k 组分的摩尔熵和焓，具体表达见正文。

热完全气体混合物遵从道尔顿分压定律，混合气体压力等于各组分压力之和，而各组分气体仍然满足热完全气体假设。混合气体的状态方程为

$$p = \rho RT = \sum_{i=1}^{ns} \rho_i R_i T = \sum_{i=1}^{ns} z_i \rho_i T = \rho \frac{R_u}{\bar{W}} T \quad (1.16)$$

其中， \bar{W} 为平均摩尔质量

$$\bar{W} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{ns} z_i / W_i}$$

需要注意的是，公式 (1.16) 中的 R 为混合气体的特定气体常数 (Special gas constant)

$$R = \sum_{i=1}^{ns} z_i R_i \quad (1.17)$$

R_i 为第 i 个组分的气体常数

$$R_i = \frac{R_u}{W_i} \quad (1.18)$$

其中 R_u 为气体常数 (又被称为摩尔气体常数、普世气体常数、理想气体常数) 其值为 $R_u = 8.3144598 J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$ 。每一气体组分均遵从热完全气体假设，工程上通常采取拟合公式来得到每一组分的热力学参数，如等压比热 C_p 等，会在正文中详细说明。

1.2 可压缩流中间断问题的理论研究简介

随着计算机技术的发展，数值求解已经慢慢成为研究各类方程的最主要工具。同时，伴随着学科的细化，数值研究和理论研究已经俨然成为两个相去甚远的方向。但是，数学理论一直都是数值方法的源头，也是数值研究的合理性所在。所以，尽管本文并不开展这方面理论性研究，然而仍有必要在引入数值方法之前简单介绍相关的数学理论的发展历史和现状。

1.2.1 Euler 方程弱解及解存在性的研究

Euler 方程遵循双曲守恒率，关于非线性双曲守恒率方程的理论研究基本上是从广义函数和弱解的概念被学者们熟知后才开始。1950 年 E.Hopf [137] 给出关于 Burgers 方程的严格数学理论研究，被认为是双曲率数学研究的奠基性工作，这之后有了这方面一系列重要工作 [166, 167, 214–216] 等。如，由于弱解定义不能保证问题解的唯一性，Lax [167] 和 Oleinik [214] 分别提出的保证解唯一性的熵条件。第二次世界大战中，跨音速飞行器出现，使人们越来越多的关注空气动力学研究及激波现象，也推动了守恒率方程研究的发展。

理论上，对于非线性双曲守恒率方程，即便初值充分光滑，在足够长的时间内，解都会失去光滑出现奇异性，这一现象被称为解的爆破。弱解的定义可针对于如下一般形式的双曲守恒率方程

$$u_t + \nabla_x f(u) = 0, \quad (1.19)$$

其中 $t \in R_+$, $x \in R^d$, $d \geq 1$, $u = u(t, x) \in R^n$, $n \geq 1$, $f(u) = (f_i^j(u))_{n \times d}$ 是 $n \times d$ 的矩阵。

弱解定义 [357]: 如果可测向量函数 $u = (u^1, \dots, u^n) : \Omega \subset R_+ \times R_x^d \rightarrow R^n$ 满足

1. $u \in L_{loc}^1(\Omega)$,
2. $f(u) \in L_{loc}^1(\Omega)$,
3. 对于所有 $\phi \in C_0^\infty(\Omega)$ 都满足

$$\int \int_{\Omega} u^j \phi_t + f^j(u) \cdot \Delta_x \phi dx dt = 0, \quad j = 1, \dots, n,$$

则称 u 在分布的意义下满足双曲守恒率方程 (1.19)，或称 u 为方程 (1.19) 的一个弱解。其中 R 为实数空间， L_{loc}^1 为强可测一阶可积空间 [351]， C 为复数空间。

然而，由于缺乏针对于弱解有效的数学工具，如泛函分析等常用的标准微分工具都不再奏效，当前仅对单守恒率方程有完善的理论研究 [66, 166, 216]，而对于方程组理论的研究，目前主要停留在一维问题，及两方程的二维问题。研究内容也从奢求理论解转移到证明方程解的存在性及数值解的收敛性上来。目

前理论研究方法主要包括 Glimm 格式 [104] 和补偿列紧理论 [342, 348]。Glimm 格式曾经是研究方程组解存在性定理的唯一方法，1965 年 Glimm 采用该方法证明了一维单方程的一般形式下“小初值”和特殊形式下“大初值”解得存在性，其中“小初值”指的是初始值总变差 $TV(u_0)$ 充分小，并和 Lax [106] 证明了 2×2 方程组在严格双曲，非线性情况下，初始扰动充分小假设下弱解的存在性。然而该方法依然存在有很多局限性 [190]。补偿列理论在 80 年代由 Tartar 提出 [281, 282]，之后得到广泛研究和应用，尤其在气体动力学方程中，如 1983 年 DiPerna 等 [75]，1985 年 Ding 等人 [49, 74]，1994 年和 1996 年 Lions 等 [180, 181] 的一系列工作解决了气体动力学方程组在不同比热比 γ 的如下形式的等熵流动方程解存在性问题。

$$\begin{cases} \rho_t + (\rho u)_x = 0, \\ (\rho u)_t + (\rho u^2 + p(\rho))_x = 0, \end{cases}$$

其中， $p = p_0 \rho^\gamma$ 。但是我们知道，尽管在无黏、无传热流体中，流体穿过激波也并不是等熵过程，虽然后续工作，如 Huang 等人对等温过程也给出了存在性证明，但是目前补偿列紧理论只能适用于严格双曲 2×2 方程组

$$\begin{cases} u_t + f(u, v)_x = 0, \\ v_t + g(u, v)_x = 0. \end{cases}$$

该方法也尚不能给出 Euler 方程解存在性证明。对于高维问题，目前是数学上的一个热点问题，当然也是难点，尚缺乏充分的理论结果 [224, 261, 280]。不过我们都坚信，欧拉方程乃至 NS 方程解的存在性和唯一性终有一天都会得到完善的数学证明。

1.2.2 黎曼问题和 Euler 方程近似解

尽管欧拉方程的解在数学上缺乏足够的存在性证明，但是我们仍然需要通过一定方式求得它的近似解，甚至近似解本身要比解的存在性研究更为久远。我们可以一直追溯到伟大的数学家、物理学家伯恩哈德·黎曼。1858 年，黎曼 [239] 在研究激波管问题时，巧妙的构造了 Euler 方程在一组特殊初值条件下的理论

解, 这组初值设定为任意间断值的阶跃函数, 即

$$U = \begin{cases} U_L & x < x_0 \\ U_R & x \geq x_0 \end{cases}$$

根据间断不同, 黎曼构造出了四类解, 分别由向前、向后稀疏波和向前、向后激波组成, 并利用相平面分析方法给出了判别条件。该类 Cauchy 问题被称为黎曼问题。尽管黎曼问题在黎曼所有伟大工作中并不是那么显眼, 但是该问题在求解拟线性双曲方程尤其在求解空气动力学方程中起到了第一块基石的作用 [99], 并且开创了微分方程广义解概念及相平面分方法之先河, 具有极大的超前性。1957 年 Lax [167, 225, 226] 对一维黎曼解存在性和唯一性给出了证明。至此, 一维黎曼问题得到彻底解决, 它的理论解由冲击波, 中心稀疏波和接触间断三类基本波构成。

二维黎曼问题由于复杂性, 到了 80 年代, 甚至问题的提法都尚未澄清。85 年, 张同和郑玉玺分析最简二维模型黎曼问题, 成为二维问题的一个实质性突破。1990 年他们在文献 [336] 中给出一套分析和猜想, 他们假设初始间断线在 $t > 0$ 时发出一道平面基本波, 这样四道波相互作用会形成 16 类不同问题。随着数值计算的发展, Schulz 和 Carsten [249], Chang [46, 47] 等, Lax 和 Liu [169] 对这一猜想进行了数值模拟, 并最终将二维黎曼问题完善为 19 类。目前为止, 尚没有一类情况被完善证明 [355]。

黎曼问题的重要意义并不仅在于它是对流方程的一组理论解, 而在于它是构造更一般 Cauchy 问题近似解的基础, 通过将一般的初值离散成有限个黎曼问题, 然后采用拼接的方式得到下一时刻值的分布, 以此来推进时间的发展, 使得近似求解一般初值 Euler 方程乃至所有非线性对流方程成为可能。

1.3 计算流体力学和数值方法发展

理论研究虽然非常严谨, 但是远远无法满足多变的工程需要。尤其在流体力学领域, 早期工程研究主要通过实验模拟完成。随着计算机技术发展, 数值研究的优点不断彰显, 如, 省钱、省人力、模拟更为灵活, 同时能给出更为详细的计算资料, 又如, 数值模拟可以免受研究问题尺度、环境限制等。

1.3.1 计算流体力学简介

采用数值离散逼近方法求解和研究方程原本就是数学中的常用手段，如有限差分方法早在 19 世纪前就经常用来分析方程性质。伴随着非线性双曲型守恒率方程理论的完善，以及人类计算能力的极大提高，通过数值方法求解双曲率方程成为数学研究的一大分支。尤其在流体力学研究中，通过数值方法求解流体力学控制方程已经发展成了独立且庞大的一门学科——计算流体力学 (CFD)。

学者们普遍将 1922 年 Lewis Fry Richardson 采用数值方法预测天气的工作 [237] 作为 CFD 开始的标志，在同时期，美国学者也曾采用世界上第一台通用计算机 ENIAC 进行了类似的 CFD 计算。实际上 CFD 尚未真正出现前，相关理论工作早已开始，我们上节已经讲述了大量此类工作，包括 CFD 出现后的大量工作，都可以被划归在数学范围内，我们当然也可以称它们为 CFD 的早期理论研究。如 1928 年，Coutant、Friedrichs 和 Lewy [62] 提出有限差分方法求解偏微分方程时收敛的 Courant-Friedrichs-Lewy(CFL) 条件，值得注意的是 CFL 条件只是数值解收敛的一个必要条件，并非充分条件，很多论文甚至书籍提到这项工作时曾出现错误。

计算流体力学成为了独立学科以后，研究重点也有了很大偏移，基于其工程背景的要求，区别于数学理论研究，CFD 绝大部分工作都集中于数值方法的发展、工程应用的推广以及以 CFD 为工具的物理机理性研究上。从 70 年代开始，伴随着数值方法、模型方程、网格划分以及计算机软硬件能力不断提升，CFD 真正得到了广泛应用，从航空、气象、船舶、化工到体育、动画等等各个领域都慢慢有了 CFD 的身影。1981 年第一代商业化软件 PHONICS 出现，标志着 CFD 从科研向工程应用的延伸。进入 90 年代，一大批优秀的商业软件涌现，如 FLUENT, CFX, STAR-CD 等等，在此基础上，CFD 工程师也成为许多行业中不可或缺的角色，推动着其他相关学科的研究和工业化的发展。

1.3.2 数值方法的发展

流体力学方程的数值方法从大的框架可以分为有限差分法、有限体积法、有限元法、边界元法和有限分析法等。各个方法具有不同的求解区域离散方式和控制方程离散方式，具有各自的优缺点，本文采用有限差分方法。

有限差分方法使用有限个网格节点代替连续的计算域，以泰勒级数展开等方法，将控制方程中的导数用节点函数值的差商代替进行离散。有限差分方法

是一种直接将微分方程变为代数问题的数值方法，直观且简单，发展较为成熟。下面简单的回顾数值方法的发展和现状。

1959 年，Godunov [107] 首先采用数值方法求解非线性偏微分方程，文中他证明，想要保持方程的解是单调的，那么线性对流格式最多只有一阶精度，同时他认为一阶迎风格式在某种意义上是最好的，并且给出了如何将迎风格式应用非线性守恒方程系统的方法。在 Godunov 的方法中，在每一个时刻，每个计算单元当成一个值，经过一个很短时间后，在单元交界面求解黎曼问题

$$U_0(x) = \begin{cases} U_L = U_i & x < x_{i+\frac{1}{2}} \\ U_R = U_{i+1} & x > x_{i+\frac{1}{2}} \end{cases} \quad (1.20)$$

在该时间步结束时进行单元平均，可以得到新的分段的分布，以此推进方程的发展。Godunov 方法整体具有一阶精度，即便处理间断时也能得到非常稳定计算结果。

从 Godunov 之后数值方法的研究变得更为清晰，Godunov 类方法主要包括，近似黎曼求解器、空间离散方法和时间离散方法。

1.3.2.1 空间离散方法

尽管 Godunov 定理将线性方法的稳定性和一阶格式紧紧的绑定，但是在西方学术圈，该研究并没有得到足够的重视，60 和 70 年代，学者们仍然试图构造了一系列更高阶的格式。P.D.Lax 和 B.Wendroff [165] 在 1960 年合作构造了二阶差分格式—Lax-Wendroff 格式，尽管该格式由于耗散不足会导致计算激波时出现严重的振荡，但是仍然具有深远影响。Lax-Wendroff 格式和它的一系列二阶、三阶改进格式 [39, 196, 243, 245] 主导了对流方程研究领域超过了 10 年之久。

直到 70 年代，才有人开始意识到 Godunov 定理的重要性并试图将其避开，这之后不到一年时间，就出现了两种无振荡的高精度对流格式，分别是 Boris 和 Book 提出的通量修正输运方法 (Flux-Corrected Transport/FCT) 方法和接下来 Van Leer 提出的 MUSCL (Monotone Upstream Scheme for Conservation Laws) 格式。FCT 方法依然采用 Lax-Wendroff 方法类似的预估-校正结构，第一步采用一阶格式预估时间发展后的解，然后在校正步通过反扩散的方式移除大量的耗散误差，达到二阶或三阶精度。在第二步，修正的通量会和临时解进行比较，并

且在需要的地方进行限制, 保证没有新的极值点出现也没有极值增加。其中的对比过程让该方法成为非线性方法。经过 1973 年到 1979 年的发展 [29,31,32,324], FCT 方法得到较广泛的应用, 但是其并没有对后期的 Godunov 型高精度格式发展起到太大影响。同时期, Van Leer 认为振荡是由于非单调插值引起的, 他继承了 Godunov 方法的特点, 将单元内的常值分布变为线性分布或二次分布, 然后非线性限制分布函数的一阶和二阶导数值, 以此得到二阶精度的稳定 MUSCL 格式 [?,293,294,296,297]。MUSCL 类格式在 80 年代继续发展并成为当时最为流行的格式。FCT 方法和 MUSCL 格式虽然相去甚远, 但是它们都是通过方法中的非线性性质来防止计算中大梯度带来的数值振荡, 在对流方法接下来的发展中一直保存了这一特点。

同一时期, Harten 在 ICASE 做访问学者, 在这里他受到 Roe 关于迎风格式工作的影响 [129], 他考虑到无振荡插值只适用在一维空间, 所以并不太接受无振荡插值的概念。实际上, 他更多的受到 Glimm 和 Lax 关于一维标量守恒方程解的总变差是不增的这一研究结果启发 [168]。通过分析, Harten 引入离散方程的总变差作为其振荡性质的度量 [110,125], 总变差同样可以应用在更高纬度求解上。由此, Harten 提出了总变差不增 (Total-Variation-Diminishing/TVD) 方法, 并推导出保证 TVD 性质的充分条件。之后学者们证明了 TVD 性质在线性方程中可以推导出单调插值条件。在当时, TVD 方法迅速成为了高精度迎风格式的代名词。

随着算法研究的发展, TVD 类格式暴露出了它们固有的不足, 如无法区分激波和光滑的极值点, 导致光滑区域精度过低。在不久之后, Goodman 和 LeVeque [110] 认为 TVD 在高维离散中过于呆板, 导致高维 TVD 对流格式精度不会高于一阶。Harten 因此重新审视了曾被忽视的无振荡插值方面的工作, 并和 Osher 合作提出了基本无振荡 (Essentially Non-Oscillatory/ENO) 格式 [127,130]。ENO 格式的基本思想是在构造插值多项式时采用自适应选取最光滑插值模板的方式来避免引入数值振荡。ENO 格式不再满足 TVD 性质, 允许总变差有微小的增加, 但是仍需满足总变差有界 (Total-Variation-Bounded/TVB)。

ENO 格式单一选取模板的策略虽然能够达到无振荡的目的, 然后由于光滑区模板的浪费造成精度仍然不足。1994 年 Liu 等人 [191] 提出了加权的思想, 将 ENO 的所有子模板进行凸组合加权取代原有的选取最光滑的模板的方法, 以此来达到光滑区的高精度并保持间断区域具有 ENO 的性质。该文章中构造了最

早的三阶有限体积 WENO 格式。随后, 1996 年 Jiang 和 Shu [266] 构造了经典的五阶 WENO 格式并给出了光滑因子和非线性权重构造的基本框架。

进入新世纪, 以 WENO 格式为代表的高精度激波捕捉格式应用更为广泛, WENO 本身也在不断地发展和完善中。2005 年, Henrick [132] 指出 Jiang 和 Shu 所构造的经典的五阶 WENO 格式 (WENO-JS) 在导数为零的极值点达不到理想精度。他构造了一个映射函数来使极值点达到理想精度 (WENO-M), 在 2008 年, Borges 等人建议采用五点模板来构造高阶的光滑因子, 并发展了 WENO-Z 格式。另一方面, 更高阶的 WENO 格式也得到发展, 如七阶、九阶甚至十一阶 WENO [18, 100] 以及中心型 WENO 格式等 [177, 198]。

从以上回顾可以看出, 空间格式的研究主要关注点是在保证间断稳定下提高光滑区域的精度。然而, 保证稳定性, 一定数值耗散是不可避免的, 因此协调、处理这一对矛盾是格式研究发展的重点。尽管通过构造更高阶的 WENO 格式可以提高光滑区域的精度, 但在计算如可压缩湍流等问题时, 耗散仍然可能过大不足以捕捉小尺度的快波 [152, 335]。另外, WENO 格式本身需要较高的计算量, 通过这种方式提高精度往往是得不偿失的。

目前提高光滑区精度主要有两种方法, 一种方法是借鉴有近似谱方法分辨特性的紧致格式 [172] 的优点, 构造紧致重构 WENO (CRWENO) 格式; 另一种方法是结合高精度线性格式构造杂交格式或称混合格式 (Hybrid Scheme)。CRWENO 格式的思想是将低阶紧致模板做 WENO 格式的非线性加权重构得到激波稳定的高阶紧致格式, 这部分工作主要见于文献 [73, 101, 151] 等。研究表明 CRWENO 和传统 WENO 格式相比, 的确具有更好的小尺度分辨能力 [335]。值得一提的是, 2015 年 Peng 和 Shen [227] 在 Shen 等人 [253, 257] 的多步加权 WENO 思想基础上, 构造了多步加权的 CRWENO 格式, 该格式基于紧致格式的隐式特性, 通过改善间断附近过渡点精度来改善全局精度, 取得了良好的效果。杂交格式和 CRWENO 格式相比, 由于它思想简单, 有丰富的选择, 因此应用和研究都更为广泛。杂交格式采用间断识别方法来区分光滑区域和间断区域, 然后采用激波捕捉格式和其他低耗散、计算量小的线性格式在不同区域求解, 达到兼顾两者优点的目的。常用的杂交格式有混合中心-WENO 格式 [134, 155], 混合紧致-WENO 格式 [229, 236]、混合谱方法-WENO 格式 [61] 等。由于间断识别方法在杂交格式中至关重要, 发展间断识别器也是杂交格式研究的一个热门领域。2006 年 Shen 和 Zha [256] 以 WENO-JS 和 WENO-Z 格式的光滑因子

为基础,提出了一种无参数的间断识别方法,并且构造了有限紧致格式。

1.3.2.2 近似黎曼求解器

近似黎曼求解器的发展是和空间离散方法同步进行的。黎曼求解器的作用是了解决非线性方程线性化近似的问题。在 Godunov 等的早期工作中,学者们采用基于理论解的“精确黎曼求解器”,但是这过于耗费计算量,并且和近似黎曼求解器比也并没有优势。因此,发展黎曼问题的数值解或称为“近似黎曼求解器”成为 CFD 算法研究的另一大主要方面。由于黎曼求解器主要工作就是将非线性方程分裂为正向传播和负向传播的波,以便于采用迎风格式,所以也将其称为分裂方法。分裂方法并没有和空间离散方法类似的清晰的时间脉络,种类也比较繁多,具体可以分为通量差分分裂 (flux-difference splitting)、流通矢量分裂 (flux-vector splitting)、特征重构方法和对流迎风分离压力 (Advection upstream splitting method/AUSM) 等。

通量差分分裂方法基于对精确黎曼求解器的模拟,该类方法又称为 Godunov 类方法,如最经典也最为常用的基于当地 Jacobian 矩阵线化的 Roe 求解器 [240]、基于简单波分解的 Osher 求解器 [223]、基于两波假设的 HLL 求解器 [128] 以及可以模拟接触间断的基于三波假设的 HLLC 求解器 [285]、需要迭代的双激波近似黎曼求解器 [188] 和为了避免红玉现象而提出的旋转混合求解器等。

流通矢量分裂方法基于无碰撞 Boltzmann 方程,因此该类方法也称为 Boltzmann 类方法 [129],流通矢量分裂方法将相邻单元间的分布函数进行抹平,因此较通量差分分裂有较大的误差,但是由于它们通常形式简单、易于实现,所以仍然有较多的应用。常用的流通矢量分裂方法有 Lax-Friedrichs (LF) 分裂 [166], Steger-Warming (SW) 分裂 [274] 和 Van-Leer 分裂 [298] 等。

特征分裂方法(特征重构方法)不同于在物理空间进行分裂的 FDS 和 FVS 方法,它的所有分裂和重构都在特征空间进行。在特征空间求得导数的近似后再变换回物理空间。该类方法具有最好的求解质量,严格保证了局部特征方向,然而由于其过大的矩阵运算,目前仅常用在一维问题的求解中。所有流通矢量分裂的分裂方法都可以应用在特征分裂中。

对流迎风分离压力方法是从 Van Leer 分裂方法发展而来的,它们将无粘通量分裂为与特征速度相关的对流项和与特征声速相关的压力项,进行分别处理。

该类方法兼具了 FVS 和 FDS 的一些优势, 具有 FVS 的简单性和效率, 又具有 FVS 的精准性, 自 Liou 在 1993 年 [186] 提出以来就得到了广泛的关注和发展。目前应用较为广泛的有可以避免“Carbuncle”现象的 AUSM+ 格式 [183,185]、激波计算稳定的 AUSMDV 格式 [300], 以及结合了它们优点的 AUSMPW [158] 和 AUSMPW+ [157] 格式。以上这些方法由于将总焓从能量方程分出, 所以也可以统称为 H-CUSP (Total enthalpy convective upwind and split pressure) 方法, 然而从特征值系统看的话, 总焓并不能沿着传播方向保持守恒 [330,330], 而总能却保持守恒, 据此 Zha 提出了在对流项使用总能的 E-CUSP 格式 [327,328,331], 该格式同样具有低耗散而且更为稳定。

1.3.2.3 时间离散方法

在 Godunov 类方法推广开之前的 60-70 年代, 学者们往往将时间和空间统一离散, 如当时经典的 Lax-Wendroff 格式等, 时间和空间精度也需要统一分析。随着 Godunov 类方法普及, 由于它们属于半离散方法, 时间离散和空间离散需要独立进行, 因此对流方程的时间离散方法也得到发展。

时间离散方法其实是一个极为古老的问题, 它们基本上都是来源于 20 世纪以前对如下的常微分方程的求解,

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x), x(0) = x_0, \quad (1.21)$$

如最早的一阶 Euler 方法 (1768 年)。1895 年 Runge 和 1900 年 Heun 尝试在 Euler 方法中增加子时间步, 1901 年 Kutta 最终给出了显式 Runge-Kutta 方法的一般形式。隐式方法的发展同样可以追溯到两个世纪前, 1824 年, Cauchy 为了进行误差估计, 在 Euler 方法中引入中间变量, 间接的构造了隐式 Euler 格式。但是直到 1955 年才由 Hammer 和 Hollingsworth 在 Radau 格式基础上构造了第一个二阶的隐式 Runge-Kutta 类格式 [118]。

Runge-Kutta 格式并不单指一种格式, 而是一系列的总称, 如三阶 Runge-Kutta 就可以有无数种系数组合。1988 年, Shu [265] 根据对流方程解的 TVD 性质, 给出了一组三阶 Runge-Kutta 的系数组合, 该格式被称为 TVD Runge-Kutta 格式。TVD Runge-Kutta 格式在对流方程数值模拟中得到了广泛的应用。

1.4 间断问题数值研究现状和不足

在 1.2 节我们笼统的回顾了一般流体力学的数值方法，通过这些脉络性的介绍，我们从 Euler 方程角度了解了流体力学数值方法的发展过程，但是这些介绍远没有触及到本文所要关注的间断问题。本小结将分别介绍和总结和激波、物质界面以及爆轰波相关的研究前沿。

1.4.1 激波捕捉格式和激波分辨率

在 Godunov 求解体系中，数值稳定性一直是处在第一位的。无论是早期的无振荡插值、总变差不增还是现在 WENO 格式的基本无振荡思想的提出，都是为了保证计算的稳定性。在保证稳定性基础上，改进 WENO 格式的主要工作集中在提高光滑区域的精度，尤其关注非线性权重容易出问题的极值点。对于激波，尽管光滑区域精度提高的确能改善激波的分辨效果，但是这只是高精度带来的间接作用。很少有人通过改善激波区域或附近区域精度来直接提高激波的分辨率。

2014 年，Shen 和 Zha [257] 分析了现存的五阶 WENO 格式，发现在连接光滑区和间断区的过渡点，传统 WENO 格式只有一阶精度，激波分辨率不足可能对模拟如激波引起的分离流、激波/湍流相互作用等问题的准确性产生影响。该文章在两个临近四阶模板上构造了两个四阶通量和一个间断识别方法来提高过渡点精度。在更早的工作中 [260], Shen 等人曾提出多步加权重构的思想，并试图用来解决传统 WENO-JS 格式的光滑因子在极值点不满足 $\beta_k = D(1 + O(\Delta x^2))$ 的问题。尽管该方法并不满足极值点五阶收敛的充分必要条件 [132]，但是多步加权重构的思想仍然有重要的意义。

本文基于 [257] 的研究，给出了一种新型的 WENO 格式构造方法，该方法结合了 Henrick 的映射函数，并通过逐阶构造的方法来提高 WENO-Z 在过渡点精度、降低耗散，进而改善对于激波的分辨率。

1.4.2 物质界面和界面追踪方法

在物理上，界面一般定义为不同物质或物质不同物理状态间分界面。根据是否考虑界面厚度，可以将界面分为传统界面和耗散界面两类。

1.4.2.1 传统界面

理论上界面是存在一定厚度的，但在真实厚度通常只有分子的量级，在绝大多数模拟中，我们将界面当成没有厚度的几何分界面，同时忽略跨过界面的扩散作用。

我们知道，数值耗散会抹平原本清晰的分界面，如果想要得到准确的界面位置就需要使用界面方法或称为界面模型。尽管目前界面方法有多种分类方式 [290]，但是多数学者都将其分为界面追踪方法和界面捕捉方法两类 [28]。

界面追踪方法是借助拉格朗日技术，采用运动网格或标记粒子来实时跟踪界面位置的变化。如锋面追踪 (Front-tracking) 方法 [71, 290, 292] 和标记 (Marker) [232] 方法就是通过引入第二套移动网格来高准确度的给出界面位置和曲率。该类方法的难点在于对界面破碎和合并的模拟较为复杂 [263, 286]。Particle-in-Cell (PIC) 方法 [36, 123] 和 Marker-and-Cell (MAC) 方法 [199, 283, 284, 318] 是通过在界面附近引入拉格朗日粒子，然后追踪粒子的运动来跟踪界面位置。粒子类方法是最为古老的界面方法 [199]，目前应用较为有限，究其原因，计算量和存储量过大是粒子类方法的一个限制，在流场压缩和膨胀的时候粒子点的管理是另外一个难点 [292]，除此之外，粒子类方法还难以给出准确的几何界面线 (面)。

另一类界面方法是基于欧拉技术，该类方法在欧拉网格内引入界面方程来定义界面的位置。最典型的方法当属水平集 (Level Set) 方法和流体体积分数 (Volume of Fluid/VOF) 法。Level Set 方法 [222, 250, 279] 采用一个光滑的距离函数作为界面函数，用该函数为零的位置来定义界面。自从 level set 方法提出后，由于它优美的数学理论、漂亮的计算结果，Level Set 方法得到极为广泛的发展和应用。当然，Level Set 也有诸多不足，如鲁棒性差，重新初始化计算量大，耗散大等，尤其被学者们诟病的是它的守恒性较其它界面方法都要更差。VOF 方法 [135, 164, 320] 也属于欧拉技术的框架，该方法在每个单元间引入一个代表某一相流体的体积分数，当体积分数介于 0 和 1 之间时认为该单元包含界面，将界面的运动转化为体积分数的变化。不同于 Level Set 方法，VOF 方法具有精确的守恒性。该方法难点在于每一步需要有效的界面重构方法，界面重构决定于当地的体积分数和梯度方向，界面可以通过分段线性插值得到 [246]，但该过程目前仍然过分复杂也难以取得预想的效果。

整体来讲，界面追踪方法更直观，在处理界面的融合和破裂时有其优势；界面捕捉方法更易于实现，在处理界面伴随流场压缩或膨胀时有优势 [179]。将这

两类方法结合，避免它们各自的缺陷是目前一个比较流行的思路，其中应用最多的是和粒子类方法相结合，比如具有粒子方法的守恒性和 Level Set 方法的光滑性的粒子-水平集（Particle Level Set）方法 [88, 89]。然而这种结合即增加了方法实现的难度，在复杂问题时也并不那么奏效。

1.4.2.2 耗散界面

通常的界面方法都不考虑界面厚度，然而，在研究某些物理问题，如研究物质间的扩散、相变（尤其对于三相点流体混合物）[143, 146]、晶体生长 [60] 及化学反应等时，界面厚度都是至关重要。这一类无法忽略厚度的界面类型被称为耗散界面（diffuse interface）[?]。

对于耗散界面，学者主要采用 Cahn-Hilliard 方程 [86, 323] 进行模拟。模拟过渡界面的方法主要有如下几种 [145]，锋面追踪方法 [292] 在界面两侧采用光滑的分布，可以追踪耗散界面，然而这种界面厚度主要是由数值耗散造成，并非可控的。Du 等人 [80, 306] 采用三条 level set 线的方法来追踪耗散界面，这种方式并不能得到界面内真实的分布，只能应用在界面厚度变化不大的情况中。还有其它方法，如连续界面力模型（continuum surface force model）[34]、相场模型（phase-field）[5, 9] 等。

本文提出一种基于欧拉网格，具有界面追踪思想的粒子方法—双信息保存方法（Dual information preseving method/DIP）。该方法既可以用来追踪传统界面也可以追踪耗散界面，模拟界面厚度变化。DIP 方法直接用来求解对流方程

$$\frac{\partial z}{\partial t} + u \frac{\partial z}{\partial x} + v \frac{\partial z}{\partial y} = 0 \quad (1.22)$$

在该方法中，引入两类拉格朗日信息点，分别称为单元点（Cell-Point）和粒子点（Particle-Point）信息点，单元点限定在单元内运动，粒子点全计算域追踪。在计算开始，每个单元分别在单元中心引入一个单元点和一个粒子点，计算中根据速度场进行位置更新。单元点负责单元和信息点间传递信息，粒子点通过修正单元点达到维持界面长时间计算的守恒性。

信息点并不同于 MAC 方法中的标记粒子，也不同于 PIC 方法中携带全部流体信息的真实粒子。主要有两点区别：

1. 信息点既是虚拟例子，又同时携带有位置信息和对流信息 z 。由于单元点是

虚拟的，所以在每一步我们都可以随时生成或抹去；信息点上携带有对流信息 z 又可以用来更新当地节点上的对流值。

2. 信息点是布置在全计算域的，并不是通过追踪信息点来达到追踪界面的目的，而是通过粒子点上的对流信息 z 来捕捉出界面的位置、曲率等各种信息。

该部分工作我们将在第五章进行详细探讨。

1.4.3 气相爆轰波

爆轰波是高速化学反应流和爆炸中常见的一类间断问题，爆轰波的传播是物理化学强耦合过程，是激波和反应界面相互作用的结果。随着爆轰波传过，波后反应物随即发生高速的化学反应形成反应界面，在反应界面中形成高温、高压爆轰产物并释放大量的化学反应热用以维持推动激波的传播，这种激波和反应界面耦合在一起运动的过程称为自持爆轰。爆轰过程根据反应物状态可以分为气相、液相和固相爆轰，它们本质上是一致的，但是气相爆轰由于本身机理最为简单，研究也最为丰富，本文只涉及气相爆轰方面的研究工作。

1.4.3.1 爆轰波理论

关于爆轰波的理论包括最早期的平衡爆轰 Chapman-Jouguet(C-J) [48, 154] 理论以及 ZND 理论。

C-J 理论将爆轰波模拟成一维稳态的没有厚度的强间断，反应界面可以看成传统无厚度界面且和激波融合在一起运动。在反应界面中，反应热的释放是瞬间完成，通过爆轰波前后守恒关系式、能量方程和爆轰波稳定传播的 C-J 条件得到波后状态。C-J 理论中所有状态都是平衡态，对应的模型为无限速率反应模型，因此无法考虑爆轰波结构，也不能解释传播机理。

直到上世纪 40 年代，Zeldovich [325], Doring [78] 和 Von Neumann [299] 对 C-J 理论进行改进提出 ZND 理论。ZND 理论中，爆轰波由前导激波和被激波诱导的反应区组成，前导激波提供一个绝热压缩过程，导致反应物温度、压力升高，分子活化，这个阶段称为诱导阶段。诱导阶段过后化学反应开始，热量大量释放，产生向后膨胀作用，驱使爆轰波传播。图 1.1 是一个典型爆轰波压力曲线，在前导激波过后压力突跃到 p_N (称为 Von Neumann 峰)，随着反应进行，压力急剧下降，在反应终了，压力降至 p_{CJ} ，经过 C-J 面，爆轰产物进入等熵膨胀的 Taylor 膨胀区。

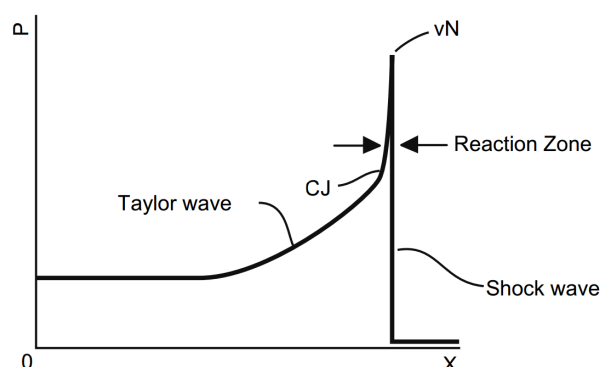


图 1.1: 典型爆轰波压力曲线 [262]

ZND 理论假设反应流动是一维均匀且不可逆的，并假设反应区的每一个断面都处在热力学平衡状态。该理论虽然能描述爆轰波的一维稳态结构，并能预测爆轰波的波速，但是仍然不是完美的模型。实际上，对于几乎所有可燃气体，爆轰波波阵面都是本质不稳定的。不稳定性会产生更复杂的一维和高维的物理现象。这种不稳定性主要取决于反应的活化能 $E_a/(RT)$ 。

在一维上，不稳定性会造成爆轰波在传播方向上的脉动振荡，表现为压力峰值随时间在 Von Neuman 峰值附近有规律的上下脉动 [92, 171]。对于活化能较低的爆轰，脉动通常在 $0.8-1.6P_{vn}$ 之间。对于高活化能的强不稳定爆轰，脉动更为剧烈，可能会存在熄火和重新起爆过程。

在高维上，除了有径向不稳定性外，横向也会叠加脉动，产生横向波，造成波阵面的三波点。三波点在空间上运动、碰撞和反射的轨迹，构成了鱼鳞状的胞格结构。和一维类似，对于活化能较低的爆轰，横向波很弱，甚至可以看成声波。因此波阵面上过驱的马赫杆和欠驱的入射激波差别很小，都是爆轰波，分布也非常规则，产生的胞格非常均匀。相反，如果爆轰波不稳定性较强，横向波也同样变强，造成马赫杆和入射波强度差别较大。入射波甚至会衰减到局部熄火，然后在下一次三波点碰撞中重新起爆。对于这种情况，胞格结构会非常不规则。图 1.2 是二维均匀的胞格结构示意图。

目前，由于理论分析无法解释不稳定性和空间结构等问题，爆轰波的数值模拟变得更加主流，尤其是采用能反映化学动力学细节的基元反应模型进行计算，可以定性与定量的再现爆轰波的胞格 [343, 352]、旋转爆轰 [42, 346]、熄火区 [349] 以及其它的一维或高维的不稳定现象等。尽管数值模拟具有便于实现，

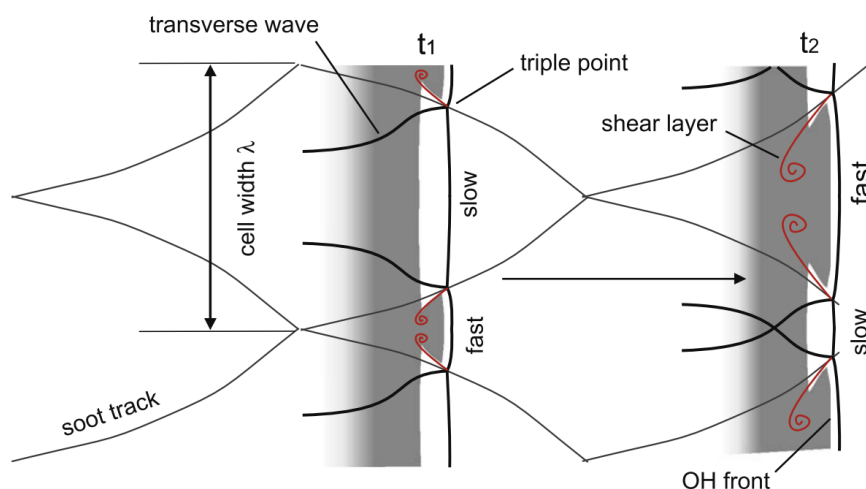


图 1.2: 二维胞格结构示意图 [262]。

可以模拟复杂工况等优点，然而在爆轰的计算中仍然有一些问题和难点，其中比较显著的是化学反应时间尺度和空间尺度过小的问题，尺度为系统特征的一种度量，详细的解释见附录 A。时间尺度过小，会导致源项存在时间刚性，需要更小的时间步或是更稳定的时间方法进行求解。空间尺度过小，可能导致空间刚性问题，产生非物理的计算结果。在采用基元反应模型的爆轰波模拟中，空间尺度过小还可能引起组分守恒性问题和爆轰中结构计算不准确等问题。

1.4.3.2 源项数值刚性问题的时间方法

在高速化学反应流的模拟中，经常会遇到化学反应源项存在刚性的问题，这种刚性体现为反应时间尺度远小于流动所采用的时间步长。例如，很多燃烧反应精确计算所需的时间步要精确到纳秒的量级 [209, 271]，在真实计算中，由于计算能力的限制，我们无法将总体的时间步长缩小到该量级。如果采用和对流过程统一的时间方法而不做特殊处理，如采用最常用的显式的 Runge-Kutta 格式时，可能会造成计算不准确或存在较为严重的数值振荡甚至发散。

对于时间尺度差异带来的求解问题，目前主要有两种解决方法。一种方法采用源项点隐 (Point implicit) [81] 或者全隐式的方式 [91] 整体求解，这种方法称为耦合方法。另一种方法通过算子分裂将源项分裂出来，然后采用独立的时间方法和时间步长进行处理，这种方法通常称为解耦的方法耦合方法的主要优点在于避免解耦误差。然而该类方法需要求解大型矩阵，随着反应模型复杂，

矩阵也会更加复杂。另外耦合方法由于为了简化矩阵运算会引入一系列的近似, 结果上耦合方法和解耦方法比并不能体现出太多的优势 [160], 因此, 目前更多学者都采用解耦方法。

解耦方法通过算子分裂, 将化学反应流动方程在时间步内解耦成对流和反应两个子步, 然后分别采用与各自的特征时间尺度相匹配的时间步长进行计算。这样处理由于较为灵活, 也比较符合物理直观, 因而得到广泛的应用 [175, 200, 201]。分裂方法通常采用 Strang 分裂, 既能有二阶的精度, 又可以减小反应步时间步长, 但是也有学者指出 Strang 分裂在计算间断问题时只有一阶精度, 且没有一阶分裂方法准确 [64]。

对流子步的计算仍采用常用的 Euler 方程求解, 反应子步通常具有如下 ODE 方程形式

$$\frac{dz}{dt} = f(t, z), z(0) = z_0, (z \in \mathbb{R}^s, t \leq 0). \quad (1.23)$$

关于该方程非刚性情况的研究早在 80 年代就已经已经较为成熟 [116, 308], 最为著名和常用的当属单步的 Runge-Kutta 格式, 包括各类显式 RK 和隐式 RK 格式, 而且同样可以应用在如对流方程求解中, 这在前文对流方程时间方法中有指出, 不再赘述。

而对于刚性 ODE 方程, 目前主要有减小时间步长和采用隐式格式两种方法。第一类方法可以采用刚性不稳定格式, 如一阶显式 Euler 格式, 在每一个对流步采用很多的子时间步进行计算, 时间步长的选取可以采用固定步长或自适应步长两种方式。采用固定步长需要预设步长, 并且不能随着刚性的变化采用最节约计算成本的步长。采用自适应步长 [153] 避免了固定步长的一系列问题, 但是在计算刚性不强的问题上时由于采用的格式精度不足可能会存在过大的误差。

隐式类格式通常具有较好的刚性稳定性 [209], 可以构造任意阶高精度的刚性稳定的隐式格式, 然而, 采用隐式格式需要进行大量的收敛迭代和矩阵运算, 在求解形式简单、方程较多的 ODE 方程组中鲜有应用。

除上述两类常见方法外, 也有极为稀少的具有显形式的刚性稳定格式兼具两者的有点, 如目前较为常用的线化梯形公式(linearised Trapezoidal method/LT) [305, 334], 该方法具有二阶精度, 且在一定程度上刚性稳定, 通常都不需要进行迭代。但是线化梯形公式也仅有二阶精度, 相比于对流步的三阶、四阶 Runge-Kutta 时间精度, 这远远是不够的。另外, 线化梯形公式也并非绝对稳定的, 在

道刚性更强的计算中，仍可能崩溃。

在本文中的第 三 章中，基于数值摄动的思想 [98,321,338]，构造了针对于求解 ODE 方程的三阶摄动格式，该格式具有显式形式因此无需迭代，具有很好的刚性稳定性，非常适合用来求解刚性 ODE 方程（组）。

1.4.3.3 刚性化学反应流动的空间刚性问题

上面我们介绍了源项刚性带来的时间尺度问题，该问题可以通过算子分裂结合有效的 ODE 求解方法来避免。但是如果问题中的刚性进一步加大，这种影响会在空间求解上也有所体现。最具有代表性的问题是模拟高速化学反应流时爆轰波的虚假传播问题。这一问题最早出现在 Colella 1986 年的研究 [59] 中。他在数值模拟反应欧拉方程时发现，如果存在间断，如爆轰波，计算结果中经常出现错误的波速和结构。1990 年，LeVeque 和 Yee 发现即便在含源项的线性波动方程中也可能存在相似的间断虚假传播问题。这一问题在接下来二十年时间内受到广泛的关注和研究 [20–22, 44, 305, 334]。图 1.3 给出一组典型的爆轰波虚假传播的计算结果。这一类源项刚性会导致爆轰波空间求解问题的流动又被称为刚性化学反应流（Stiff reacting flow）。

刚性化学反应流产生根本原因是由于极快的反应速度造成空间上的反应区域既反应界面也极为狭窄。如果采用达到小于反应区域尺度的空间网格来数值模拟自然可以避免所有的空间刚性问题，这种求解通常称为完全求解（fully resolved）。然而这个尺度往往是达不到的，例如，在尚不存在空间刚性的氢氧爆轰求解中，最理想的求解尺度已经达到 $10^{-7}m$ 量级 [234]，刚性化学反应流的完全求解尺度可能会更小。因此，我们一般只能采用网格尺度远大于反应界面厚度的网格进行求解，这种求解称为不完全求解（Underresolved）[20]。在不完全求解情况下，如果不采用特殊的方法，我们将无法在网格内追踪反应的传播。格式的耗散不可避免会抹平组分和温度曲线，造成部分反应在激波前的错误激活，这种激活会产生非物理的状态。该状态随着计算累计就会造成虚假传播现象。关于该问题，在正文中会有更详细的分析。

2012 年 Wang [305] 对这 20 年关于避免刚性化学反应流中虚假传播现象的研究进行了回顾。Bao 和 Jin 在刚性流假设下，在源项中发展了一种随机投影的方法来捕捉爆轰波 [20–22]，但是该类方法无法应用在无刚性问题中。Zhang 等人提出了一种平衡态的方法（ESM）[334] 来抑制虚假状态的产生，然而该方法是和空间格式相关的，难以推广到高阶格式，除此之外该方法最大的问题

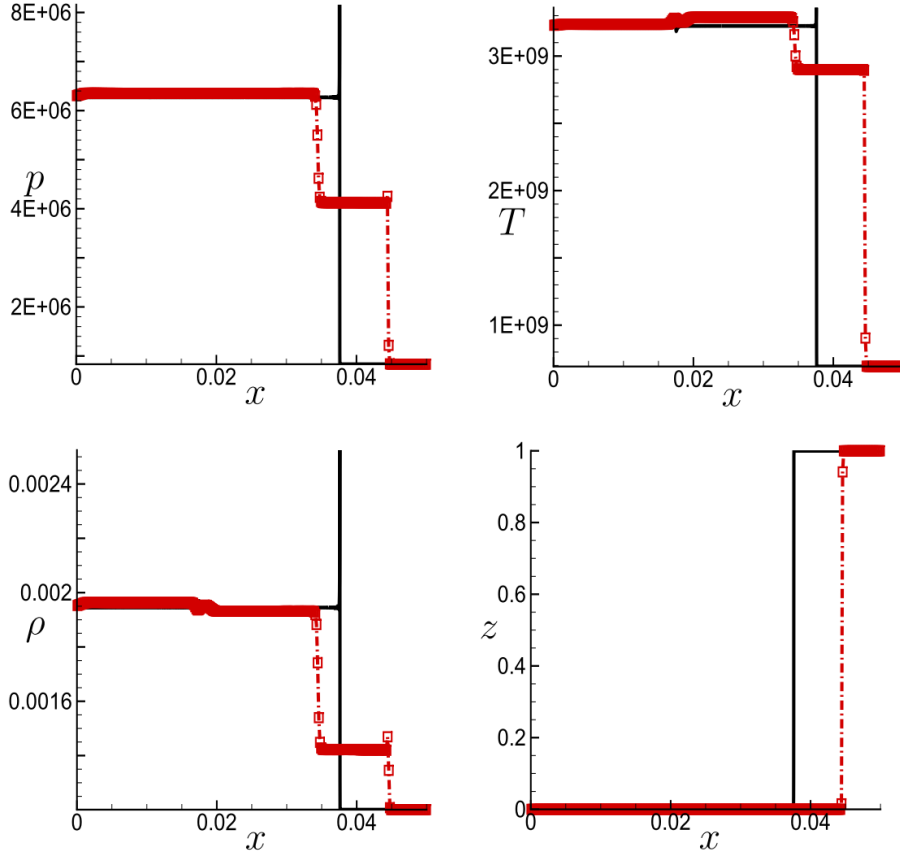


图 1.3: 一个典型的爆轰波虚假传播计算结果 [305]

是, 对于复杂的化学反应, 往往没法预先知道平衡态。Chang 基于 HartenENO 子网格重构的思想 [126], 发展了对流步的有限体积 ENO 方法 [44], Wang 等人 [304, 305] 提出了结合了反应步子网格重构思想的高阶有限差分格式。然而, Yee 等人 2013 年指出 [314], 子网格重构方法和他们自己提出的非线性限制器方法 [317], 只能在一定稀疏的网格和适度的源项刚性情况下推迟非物理传播现象的出现, 但是随着网格稀疏或是刚性进一步加强, 虚假传播现象仍然会出现。

理论上, 化学反应界面作为界面问题的一类, 可以应用上文所列的各种界面方法进行模拟。如 VOF 方法、Level set 方法以及锋面追踪方法等都曾用来追踪预混火焰面 [208, 231]。也有人尝试采用追踪激波面的方法来抑制虚假传播这一非物理现象 [210]。然而, 除极少数的可以采用 C-J 模型的问题外, 反应面都是有一定厚度和内部结构的, 因此只能采用耗散界面模型进行模拟。

近些年,有人尝试采用结合了拉格朗日粒子和欧拉背景网格的拉格朗日-欧拉 (Lagrangian-Euler/LE) 方法来求解线性对流-扩散方程 [77,187,206,269],取得了较好的效果。LE 类方法基本思想是采用适当的算子分裂技术将模型方程分成不同的部分,然后选用欧拉方法或是拉格朗日方法来对应求解 [187]。2007 年 Shipilova 等人 [264] 尝试用一种 LE 方法 (PTM 方法) 求解对流-扩散-反应方程,数值结果显式 PTM 方法即便在很稀疏的网格下也可以有效的抑制数值振荡。这种 LE 的思想并不新颖,实际上所有界面追踪类界面方法都是采用的同样的思想,只是他们仅将拉格朗日粒子或网格用来追踪界面,当时并没有人将这种思想用来直接求解方程本身。目前,这种 LE 方法仅用来求解简单的方程、方程组,尚没有人采用类似的思想求解化学反应方程系统。

在论文中第 ?? 章中,我们采用算子分裂方法,将化学反应欧拉方程分裂为 Euler 方程和组分方程,然后再将组分方程进一步分裂为组分对流方程和反应 ODE 方程,组分对流方程采用 DIP 方法求解。由于 DIP 方法可以无耗散的捕捉反应界面的运动,因此避免导致源项错误激活的数值耗散产。该部分工作在正文中会有更详细介绍。

1.4.3.4 基元反应模型下爆轰波的数值模拟

空间刚性问题一般只出现在总包反应的单方程模型和较为简单的多步反应模型中或是更为严苛的反应条件下。为了更准确的模拟反应动力学过程,我们通常会采用能反映化学动力学细节的基元反应模型进行计算。基元反应模型的求解中,空间刚性问题在并不是常见现象,但是其中仍存在空间分辨率不足等问题。实际上,每种组分的反应率相差很大,图 1.4 给出氢氧爆轰过程不同组分变化和诱导激波前沿距离的对数曲线,可以看到在距离诱导激波 $10^{-4}cm$ 左右,某些曲线如 OH 就开始变化;对于绝大多数组分都在距离诱导激波 $10^{-4}cm$ 和 $10^{-2}cm$ 之间出现变化;到了 $x \approx 10^{-2}cm$ 后所有组分都会有剧烈变化。图 1.5 是通过特征分析给出的化学反应各组分空间尺度和激波前沿距离之间的关系,从中也可以看出,同一空间位置不同组分空间尺度之间差异、同一组分不同空间位置空间尺度同样存在巨大差异。

对于爆轰空间尺度问题,目前除加密网格外,并没有其它特别完善的解决办法。如自适应网格加密技术可以通过在不同空间尺度的区域实时采用不同大小的网格,似乎非常适合爆轰波的计算 [43,149],但是目前该类技术在爆轰计算仍有很多困难,因此也并不常用。在固定网格和有限的计算资源下,想要达

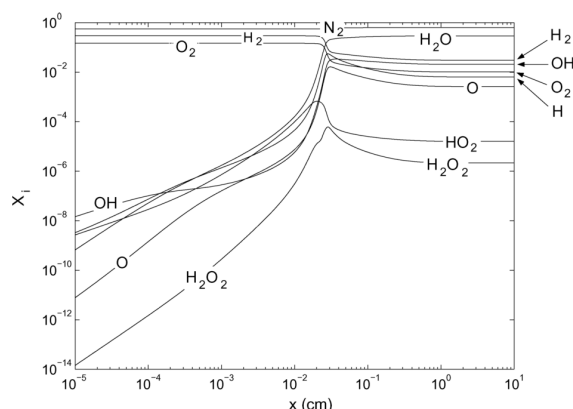


图 1.4: $2H_2 + O_2 + 7Ar$ 反应组分摩尔比变化和激波前沿距离间关系 [234]

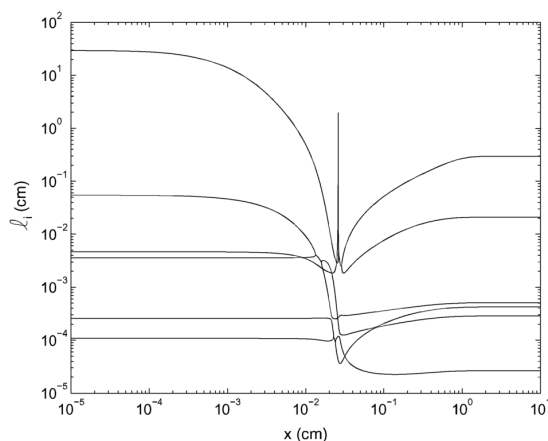


图 1.5: $2H_2 + O_2 + 7Ar$ 反应不同特征值空间尺度和激波前沿距离间关系 [234]

到完全求解每一空间尺度几乎是不可能的，其中空间尺度较小的组分曲线会由于网格分辨率不足导致的过度耗散而抹平、对应的反应区拉长。爆轰波和激波不同，耗散对于激波而言并不能改变激波前后状态，但是爆轰波组分计算不准确会导致不精确的化学反应结果，得到错误的反应产物，进而影响整体的结果。对此，Powers [234] 等人总结出三点：

- 1) 想要准确预测诱导区尺度需要对引起这一强非线性现象的物理问题在恰当的尺度合理的求解。但是目前没有发现任何文献对诱导区尺度做过网格收敛分析，所以很难说这些物理问题是否被合理求解了。
- 2) 对于弯曲的爆轰波，新的几何尺度会和反应区尺度竞争决定整体的波动特

性。能否准确的捕捉爆轰波的多维问题很大程度取决于对于反应区尺度和曲率尺度等物理问题的准确计算。

- 3) 在非定常的计算中, 任何瞬态爆轰波的高波束波长应该和定常结构中的最佳特征尺度在同一量级。在任何情况下, 尤其是在非稳定问题中, 想要完全捕捉非定常动力学过程, 所用的长度尺度需要等于或者小于最佳定常空间尺度。

和刚性化学反应流问题相似, 我们无法采用欧拉方法在不完全求解下准确计算化学反应组分, 但是我们可以通过拉格朗日-欧拉的思想进行计算来消除由于网格不足产生的数值耗散的影响。基于这样的考虑, 在第九章, 我们将 DIP 方法推广到基元反应模型下的爆轰波模拟中, 结合算子分裂方法将方程分裂为 Euler 方程部分、组分对流部分和源项部分, 针对每一部分的特征分别采用欧拉体系的高精度方法、拉格朗日体系的 DIP 方法和数值摄动方法进行求解。数值结果表明新的方法能准确的计算如爆轰波速等问题, 并且相比于传统方法, 新方法具有更好的组分守恒性和稳定性, 更高的计算精度。

1.5 本文所开展研究内容

本文分成上下两部分, 第一部分主要研究激波问题相关的方法, 包括:

- 1) 在第 ?? 章中, 针对间断附近过渡点降阶问题, 我们提出一种多步加权的思想, 并构造了五阶多步加权 WENO 格式, 结果显示新格式在激波附近区域的精度得到较大提高。
- 2) 在第 ?? 章中, 针对混合格式的关键问题——间断识别, 我们对比了现存的大部分识别方法, 认为基于 τ_5 函数的 SZ 识别方法无人参, 方便使用, 且有较好的表现, 是本文最推荐的识别方法。
- 3) 在第 ?? 章, 我们将采用了 SZ 识别方法的杂交格式——有限紧致格式推广到理想磁流体求解中, 考虑到磁流体方程有复杂的特征值系统和波系, 本文结合无需特征系统求解的 E-CUSP 类格式, 可以高精度低耗散的求解理想磁流体方程。

本文下部分主要研究界面方法及耗散界面问题。结合上部分的激波方法, 在下部分中, 本文提出了一套求解爆轰这一类激波/化学反应(耗散界面)强相互作用问题的新方法:

- 1) 由于传统界面方法存在难以处理耗散界面等问题, 在第 二 章中, 本文提出一种基于欧拉背景网格的拉格朗日粒子类方法—双信息保存方法。
- 2) 在第 三 章中, 针对化学反应流动方程中的反应源项 ODE 方程时间刚性, 本文基于数值摄动思想, 构造了一系列高阶、显式且稳定的单步数值摄动方法, 可以较好的避免时间刚性造成的 ODE 求解困难。
- 3) 在刚性化学反应流求解中, 由于爆轰波附近的数值耗散会产生爆轰波虚假传播这一非物理现象, 在第 ?? 章, 本文提出一种新型的求解反应 Euler 方程的分裂方法, 该方法结合了高精度的激波捕捉格式、DIP 方法和数值摄动方法。新方法通过 DIP 方法求解耗散界面, 抑制组分对流方程中的耗散来避免数值刚性问题的产生。
- 4) 在应用了基元反应模型的化学反应求解中, 由于组份之间空间尺度相差很大, 经常遇到组分守恒性不好、组分曲线振荡等问题。本文将第 ?? 章中构造的新的反应 Euler 方程 1 求解方法应用在采用基元反应模型的爆轰求解中, 通过 DIP 方法的 Lagrangian 特性, 新方法可以低耗散、稳定的求解组分对流过程, 避免组分振荡的发生, 保持组分的守恒性。

上部分

激波作为可压缩流中最常见的间断问题，分布极为广泛。能否稳定、高分辨率的求解激波是可压缩流计算中的一个核心问题。在本文上部分，我们主要研究和激波相关的数值方法，包括提高激波分辨能力和间断附近区域精度的新的 WENO 格式构造方法—多步加权方法，间断识别方法的比较研究等。上部分的最后，我们将采用了有效识别方法的杂交格式—有限紧致格式，应用在更复杂的方程系统—理想磁流体方程求解中。

下部分

在本文上部分，我们研究了激波相关的问题，包括提高激波分辨能力和激波周围区域精度的多步加权 WENO 格式、激波识别方法和提高光滑区精度的杂交格式等，并在更复杂的 MHD 方程系统求解中，验证了新方法的表现。我们知道，在流场的计算中，除了激波以外，还可能存在另外一种性质截然不同的间断类型—界面（接触间断），在下部分内容中，我们主要研究界面方法和界面方法在高速化学反应流中的应用，其中会涉及到和上部分相同的激波的计算问题，将不再展开讨论。

第二章 双信息保存 (DIP) 方法

界面作为最为常见的物理现象之一，广泛的存在于力学、化学、生物工程、材料科学和计算机图形学等多个学科领域。界面的准确模拟对于多相流动、晶体生长、火焰的发展和传播等等很多方面的研究都有重要意义。

2.1 不同的界面类型和界面方法

界面方法最早可以追溯到 1958 年的洛斯·阿拉莫斯国家实验室发展的 Particle-In-Cell(PIC) 方法 [90, 122]。在第一章 1.4.2 节中，对不同的界面方法都有较详细的介绍。

忽略力学模型，界面的运动可以抽象为求解对流方程

$$\frac{\partial z}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla z = 0 \quad (2.1)$$

其中 \mathbf{V} 为速度场， z 为界面处存在间断的物理量，如比热比 γ 、密度 ρ 等。下面将分别对不同类型的界面进行分析。

2.1.1 传统界面

尽管方程 (2.1) 是最简单的对流方程，然而，如果我们关注于界面的运动时，想要实时的得到几何线（面）是异常困难的。以一维图 2.1 为例，如果直接对方程 (2.1) 进行求解，例如采用差分方法，随着间断被耗散，界面将无法识别。

因此，绝大多数界面方法并不直接求解方程 (2.1) 本身，而是采用一种追踪的视角进行模拟，图 2.2 给出了不同界面方法的一维示意图。其中锋面追踪方法直接追踪界面；MAC 方法在界面一侧添加标记点；而 VOF 方法在每一个网格引入一个体积分数函数，将界面的运动转化为体积分数的变化。只有 level set 方法求解方程 (2.1)，但是也并不直接求解间断函数 z 本身，而是以到界面距离为新的函数 ϕ ，求解

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \phi = 0$$

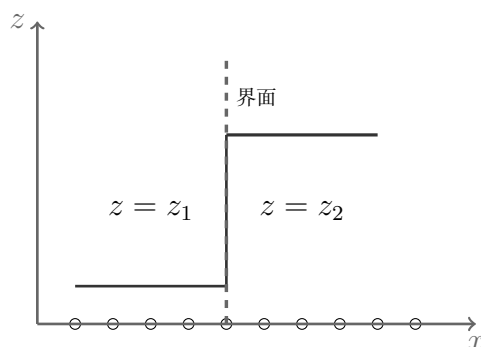


图 2.1: 界面的一维示意图

如图 2.2.d 所示, level set 方法将 $\phi = 0$ 的位置识别为界面位置。

从示意图 2.2 可以看出, 这些界面方法明显可以分成两类, 一类是全计算域进行计算的界面捕捉类方法, 如 VOF 和 level set 方法, 另外一类是只在流场部分区域进行追踪的界面追踪类方法, 如锋面追踪、MAC 方法等。两类方法各有优势, 全域计算的方法更适合处理光滑的几何形状, 并且易于处理由于流体压缩性导致的膨胀过程, 如图 2.3.a 所示; 界面追踪类方法更易于处理锋利夹角、大变形以及界面破碎等问题, 如图 2.3.b 所示。由于各有明显的优势和缺点, 有学者尝试将两种类型方法结合, 如 level set-粒子方法, VOF-粒子方法等方法。

2.1.2 多相界面和耗散界面

除了经常研究的两相界面外, 在工业、化学、生物等很多领域中存在三相甚至更多相物质之间的相互作用, 我们可以将这种问题称为多相界面问题。相比两相界面丰富的研究, 多相界面的研究无论在理论还是数值方面都很少 [156]。除多相界面外, 耗散界面是另外一类较难处理的界面问题, 我们在第一章 1.4.2.2 小结节中曾对耗散界面做过简单介绍, 如化学反应界面就是一类典型的耗散界面。

传统界面类方法求解多相界面和耗散界面困难的根本原因在于这些方法都不是针对真实的物理量进行求解, 如 γ 或 ρ 等, 而只是从拓扑角度计算界面的运动。这一问题导致传统界面类方法无法直接求解如图 2.4 所示的多相界面和具有界面厚度 δ 的耗散界面。

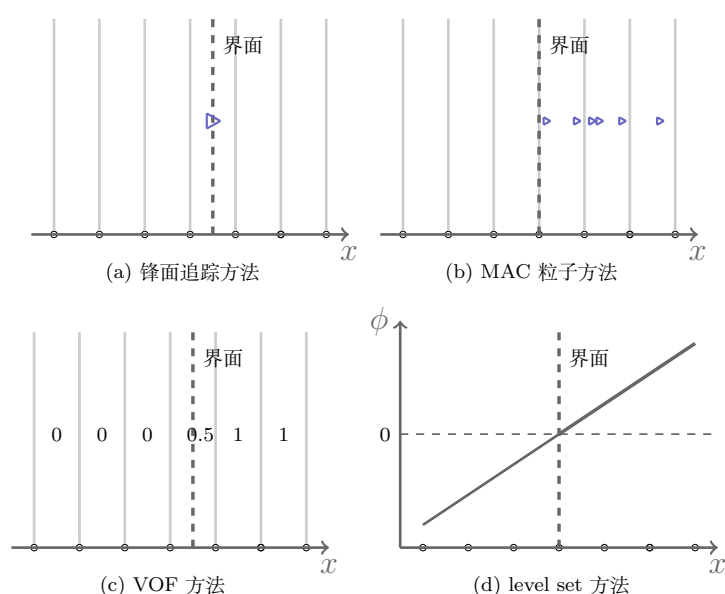


图 2.2: 不同界面方法一维示意图

2.2 双信息保存方法基本思想

首先考虑如下两个问题：

- 1, 界面捕捉类方法由于采用全计算域求解, 可以更好的处理界面膨胀(图 2.4.a)、界面张力等光滑函数问题; 界面追踪方法由于采用拉格朗日运动思想可以更好的保持界面形状、计算界面大变形和破裂等问题。我们能否同时具备两方面的优点呢?
- 2, 传统界面方法都不是直接求解方程 (2.1) 中和物理相关的输运量 z , 因此较难处理多相界面和耗散界面。界面方法能否针对输运量 z 进行求解?

下面我们将引入一种新的粒子类方法, 旨在解决这两个问题。

2.2.1 信息点的概念

粒子方法是一种最直观的界面方法, 具有优良的 Lagrangian 特性, 但是由于它们明显的不足, 学者们更愿意将它们作为一种辅助手段, 如用作示踪粒子, 或者和其它方法结合, 用粒子来修正计算结果, 如 level set-粒子方法, VOF-粒子方法等。粒子方法最大的问题是粒子的离散性和分布的随意性, 难以保证全

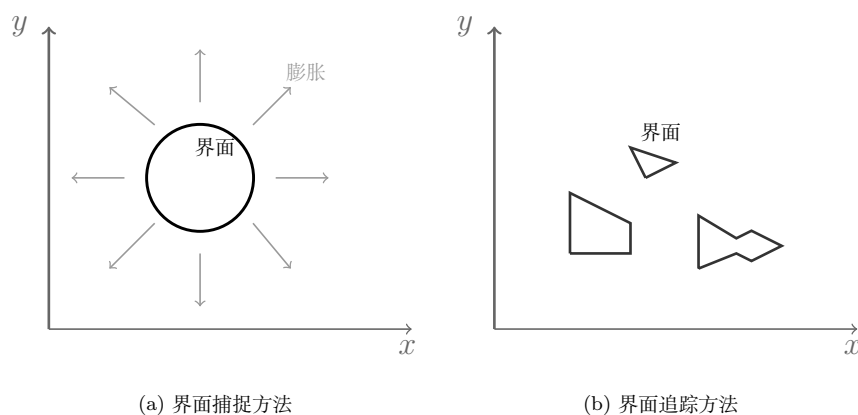


图 2.3: 不同类型界面方法适合求解的工况二维示意图

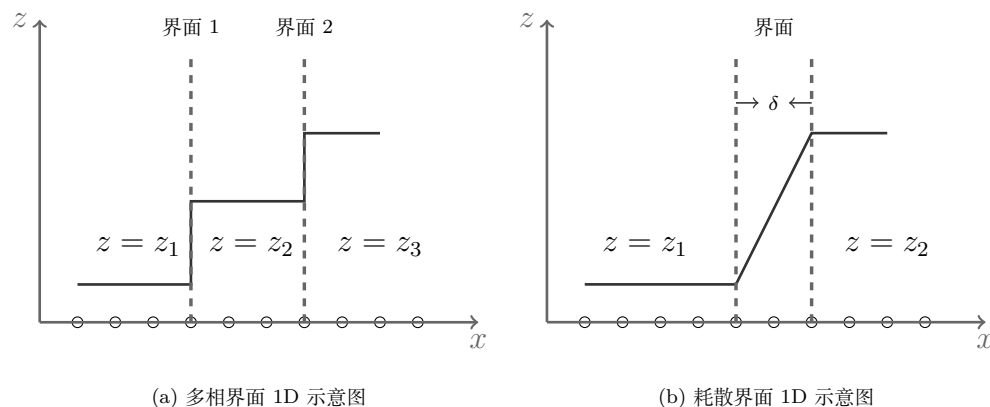


图 2.4: 多相界面和耗散界面一维示意图

域的覆盖，这样就无法像网格方法一样准确的得到任意位置的信息。粒子类界面方法主要包括早期的 Particle-In-Cell (PIC) 方法和目前仍在使用的 Marker-In-Cell (MAC) 方法。PIC 方法采用携带有质量的真实粒子模拟流体的运动，根据粒子携带的信息可以判断界面位置，然而，由于真实粒子无法人为的生成和抹去，无法保证全计算域每个网格都含有粒子。Marker-and-cell (MAC) 方法采用标记粒子，粒子除位置以外不含有其它信息，是完全虚拟的粒子，增加和减少都不会影响流场的物理性质，但是由于它完全不携带信息，只能通过有粒子和没有粒子判断界面，仍然无法做到覆盖计算域。

我们知道网格是对真实流场的离散，这种离散其实是真实流场信息在网格点上的映射，我们可以随时加密网格、减少网格或移动网格，尽管这可能影响

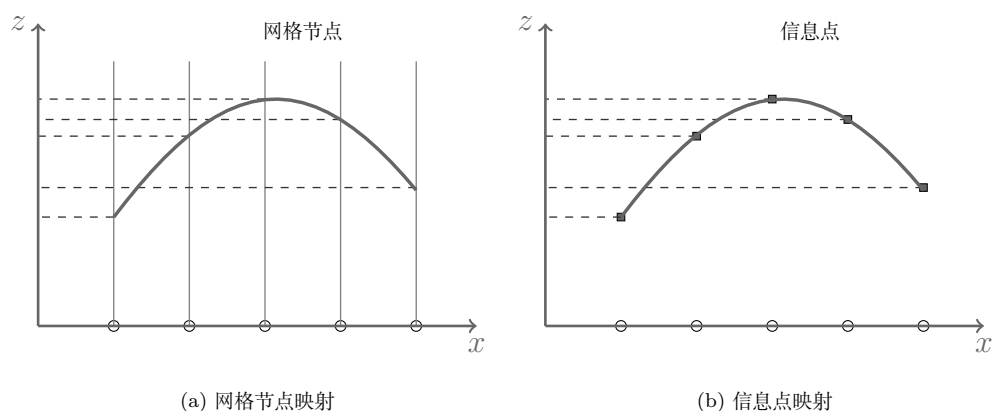


图 2.5: 信息点和网格节点类比一维示意图

计算精度，但是并不会改变所研究问题本质。如图 2.5，类比于网格点，我们可以引入一套和网格点相似的、携带有输运值 z 的粒子，这种粒子可以根据需要增加、减少和移动。我们将这种携带有输运值的 Lagrangian 粒子称为**信息点**。

本文的方法中同时含有两类信息点，因此将该方法称为双信息保存方法，下文将分别介绍这两类信息点。

2.2.2 单元信息点 (单元点)

对于固定网格方法，网格点位置是确定的，我们每个时刻都能得到确定的空间点上的计算值，并可以通过高阶插值运算得到空间任何点的近似值；对于运动网格，如自适应加密网格，我们也可以人为的控制网格加密规律，避免过分畸形的网格分布和网格形状。然而，粒子点的运动完全是由速度场决定的，所以粒子点的分布具有很高的随意性。MAC 方法也遇到相同的困难，某单元原本含有粒子，但是随着流场膨胀，单元不再含有粒子，但这并不代表该单元产生了相变。MAC 方法的解决策略是在初始计算时，在相应状态的单元内放置多达 16 个粒子来避免这种错误的发生。但是这样即增加计算和存储，又不能从根本上避免粒子分布随意性这一问题。

对于信息点可以随时生成和抹去这一特点，我们为什么不构造一个限定在单元内的信息点呢？既可以解决粒子分布问题，又可以用来传递单元上和粒子上的输运值。我们将这种每个单元内唯一的信息点，称为单元信息点，简称为**单元点 (cell-point)**。下面我们将从一维来介绍单元点求解方程 (2.1) 的步骤。

一. 初始化

如图 2.6 我们首先将 $[i - 1/2, i + 1/2]$ 定义为第 i 单元。开始计算时, 在每个单元内引入一个单元点。单元点的位置可以根据在单元内相对坐标 $X(i)$ 给出, 为了简便, 下文会在不产生歧义的情况下简写为 X 。单元点的初始条件为:

$$X(i) = 0, \quad \bar{z}(i) = z(i) \quad (2.2)$$

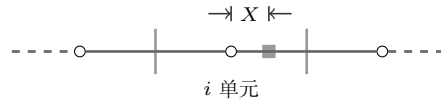


图 2.6: 单元信息点一维示意图

二. 运动追踪

单元点的运动速度是由所在的速度场决定的。通常计算中, 可以通过其它方程得到的网格点上的速度。然后通过插值可以近似求得粒子点所在位置的速度。理论上可以构造任意高阶的速度插值, 为了简便, 我们本文只采用线性插值, 以 i 信息点为例, 它所在位置速度插值为:

$$\bar{u}(i) = (1 - |X|)u(i) + |X|u(i + s_x) \quad (2.3)$$

其中 $s_x = \text{sign}(X)$, 通过相对坐标的符号决定是向正向还是向负向插值。

当粒子开始运动后, 每一步都需要确定 i 单元点位置和所在单元。单元点 i 经过 Δt 时间内运动到临时坐标为

$$L_x = X\bar{u} + \Delta t/\Delta x \quad (2.4)$$

通过临时坐标可以确定新的所在单元 M 为

$$M = i + \text{floor}(L_x + 0.5) \quad (2.5)$$

和新的相对坐标为

$$\bar{X} = L_x - \text{floor}(L_x + 0.5) \quad (2.6)$$

其中 floor 为向下取整函数。

三. 单元点的更新

为了保证单元和单元点的一一对应，我们需要在每一时间步结束时对单元点进行更新，将含有多余单元点的和不含单元点的单元进行处理。

我们首先考虑这样一个问题，对于图 2.7 中所示的情况， i 单元点上 $z = 1$ ， $i + 1$ 单元点上 $z = 0$ ，那么界面究竟是图中哪种情况呢？这在离散问题中其实是无法确定的，需要进行统一规定。根据所研究的问题是否涉及界面厚度分成无厚度界面和耗散界面两类。

1). 无厚度界面问题中单元点的消去方法

如果我们研究的是无厚度的传统界面或多相界面，我们规定界面位于 z 值较小的信息点位置，既图 2.7 中第二种情况。

如果一个单元内有多个信息点，如图 2.8，根据上面界面位置的规定，我们选择输运值 z 较小的单元点。

2). 无厚度界面问题中单元点的生成方法

在 $k + 1$ 时间步，对于没有单元点的单元 i ，我们需要在单元中心引入新的单元点，单元点上对流信息 z 可以通过回溯生成法得到。如图 2.11，回溯生成法的做法如下：

- i. 首先在计算时刻 t_{k+1} 的上一时间步 t_k ，假设我们曾在某一位置引入过一个新的单元点 P ，该点速度为 u' ；
- ii. 经过时间 Δt ，在 $k + 1$ 时间步该单元点正好运动到 i 单元中心 $X = 0$ ；
- iii. 由于不知道速度 u' ，可以假设 u' 为 $k + 1$ 时间步 i 单元中心的速度；

$$u' = u^{k+1}(i)$$

- iv. 通过逆速度，可以得到临时坐标为

$$L_x = -u' \Delta t / \Delta x \quad (2.7)$$

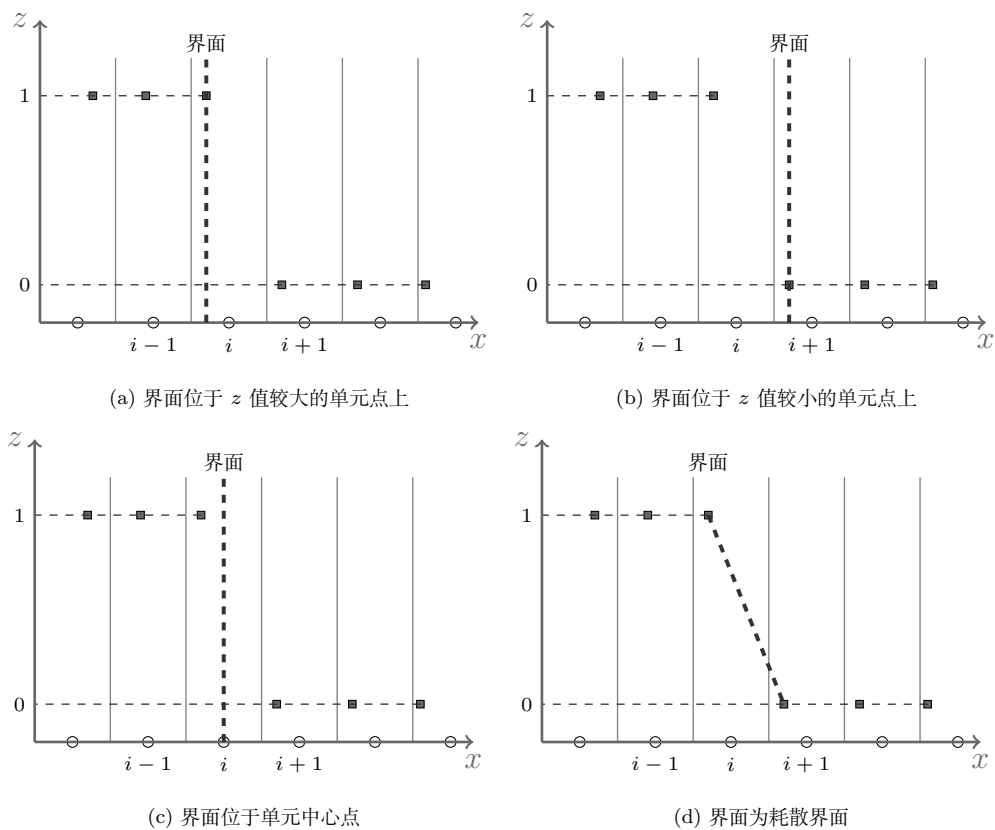


图 2.7: 界面在单元点间可能的分布情况一维示意图

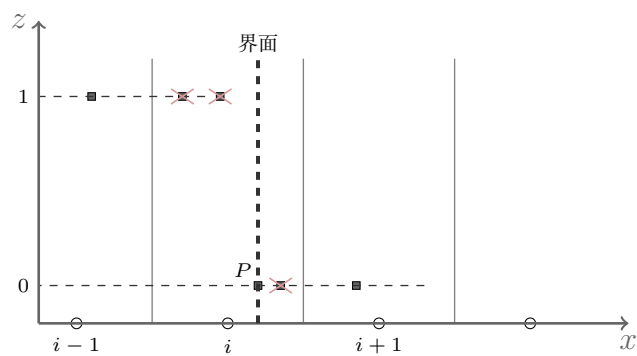


图 2.8: 无厚度界面情况中单元点的消去方法一维示意图

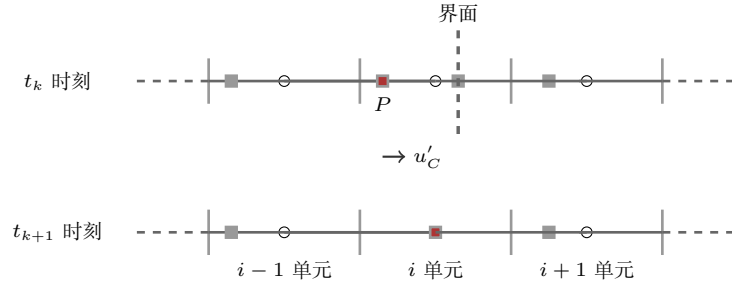


图 2.9: 单元点的回溯生成法一维示意图

根据公式 (2.5) 和 (2.6) 可以知道 P 在 k 时间步的单元为

$$M = i + \text{floor}(L_x + 0.5)$$

由于 k 时间步是已知的, 根据求得的位置就可以知道该单元输运值, 即

$$\bar{z}^{k+1}(i) = \bar{z}^k(M)$$

3). 耗散界面问题中单元点的消去方法

如果我们研究的是耗散界面, 则选择图 2.7 中第四种情况做为界面真实情况。由于耗散界面存在过渡值, 如图 2.10 所示, 如果单元内含有多个单元点, 我们采取所有单元点位置和输运值 z 算数平均的形式。

4). 耗散界面问题中单元点的生成方法

在耗散界面问题中由于没有清晰的分界面, 允许存在一定的耗散, 因此我们采用另外一种插值的方法生成单元点。如图 2.11 所示, 如果单元 i 没有单元点, 我们在单元中心生成新的单元点, 单元点上的输运值可以采用前后临近单元点加权平均的方式得到, 权重反比于到 i 单元中心的距离。新的输运值为

$$\bar{z}_i = \frac{\omega_1 \bar{z}_{i-1} + \omega_2 \bar{z}_{i+1}}{\omega_1 + \omega_2} \quad (2.8)$$

其中, $\omega_1 = 1/L_1$, $\omega_2 = 1/L_2$ 。

每一时间步, 经过单元点运动和更新的计算, 我们可以得到每个单元中单

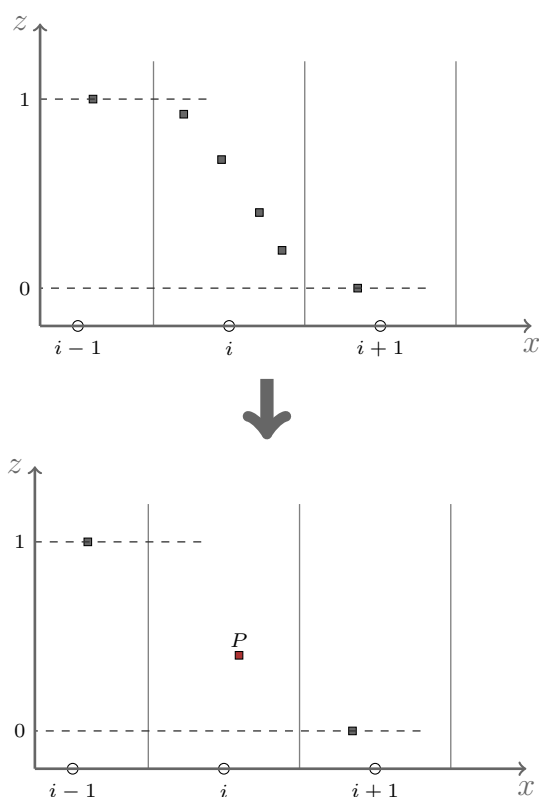


图 2.10: 耗散界面情况中单元点的消去方法一维示意图

元点的位置和输运值，然后将单元点的输运值作为该单元输运值。

2.2.3 粒子信息点（粒子点）

上文中，我们引入了单元信息点，通过单元信息点可以直接求解方程 (2.1)，无论对于传统的无厚度界面、多于两相物质的多相界面还是具有界面厚度的耗散界面都可以进行模拟。

然而，单元信息点只具备一半的 Lagrangian 特性，尽管它弥补了粒子点不能全域覆盖、无法计算耗散界面等缺点，但由于每步的更新，新的单元点会不断

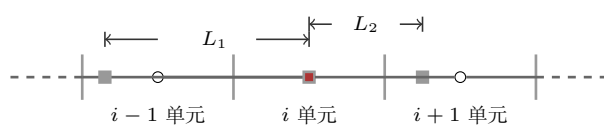


图 2.11: 耗散界面问题中单元点的生成方法一维示意图

替代旧的单元点，而新的单元点的生成存在误差，导致对界面结构的保持并不像纯粒子方法那么好。为了改进这一不足，继续保持粒子方法优良的特性，我们引入了另外一套全域追踪的信息点，在每一步对单元点进行修正。将这种全域追踪、具有纯粒子点特性的单元点，称为**粒子信息点**，简称为粒子点。下面我们给出通过粒子点修正单元点的过程。

一. 初始化

初始化时，在每个单元中心引入一个粒子点，由于粒子点是全域追踪的，我们需要为每一个粒子点建立一个无冲突的标记，这里以最开始所在单元作为标记。对于某一标记为 i 的粒子点，我们需要给出两个数组分别记录它所在单元 $ip(i)$ 和单元相对坐标 $X_p(i)$ 。初始化过程和单元点相似

$$ip(i) = i, \quad X_p(i) = 0, \quad \bar{z}_p = z(i) \quad (2.9)$$

二. 运动追踪

粒子点的运动和单元点相同，我们首先根据粒子点 i 所在单元 ip 和 X_p 线性插值出粒子点的运动速度

$$\bar{u}_p = (1 - |X_p|)u(ip) + |X_p|u(ip + s_x) \quad (2.10)$$

其中 $s_x = \text{sign}(X_p)$ 。 Δt 时间后单元点临时坐标变化为

$$L_x = X_p + u_p \Delta t / \Delta x \quad (2.11)$$

根据临时坐标可以得到新的单元位置和相对坐标：

$$ip = ip + \text{floor}(L_x + 0.5) \quad (2.12)$$

$$X_p = L_x - \text{floor}(L_x + 0.5) \quad (2.13)$$

三. 修正单元点

在 t_k 时刻，假设我们已经更新了单元点，如果单元 ip 内含有粒子点，我们则采用粒子点重新更新单元点，关于新的单元点更新策略，无论是对

于无厚度界面还是对耗散界面来说,都和通过单元点更新完全相同,只是用粒子点取代了原本的单元点。

2.2.4 边界处理

粒子方法的边界条件都很容易实现,下面我们分别介绍几种常用的边界条件。如图 2.12,首先假设我们计算从第 0 单元到 Nx 单元, DIP 方法由于在计算中可能需要临近网格的信息,因此在左右分别构造一个虚拟网格 -1 和 $Nx+1$ 。



图 2.12: 边界和虚拟网格一维示意图

一. 周期边界条件

对于单元点,将 1 单元内单元点直接赋值给 $Nx+1$ 虚拟单元,将 $Nx-1$ 单元内单元点直接赋值给 -1 单元

$$\begin{aligned} X(-1) &= X(Nx-1), & X(Nx+1) &= X(1), \\ \bar{z}(-1) &= \bar{z}(Nx-1), & \bar{z}(Nx+1) &= \bar{z}(1) \end{aligned} \quad (2.14)$$

对于粒子点,如果有粒子流出,即 $ip(i) > Nx$ 或 $ip(i) < 0$, 则

$$\begin{aligned} ip(i) &= ip(i) - Nx, & \text{if } ip(i) > Nx \\ ip(i) &= ip(i) + Nx, & \text{if } ip(i) < 0 \end{aligned} \quad (2.15)$$

而 $X_p(i)$ 保持不变。

二. 人流条件

假设左侧为入流,对于单元点,我们令左侧虚拟单元 -1 中的单元点始终放在单元中心,输运值为入流值。

$$X(-1) = 0, \quad \bar{z}(-1) = z_{in} \quad (2.16)$$

对于粒子点随着流体流入，我们在入流中添加新的粒子点，粒子点的总数会出现浮动，假设粒子点的数量用 N_p 表示，初始时 $N_p = Nx$ 。当 0 单元中不存在粒子点时，将新的粒子点放置在单元中心，粒子点的输运值为入流输运值，粒子点总数加 1。

$$\begin{cases} N_p = N_p + 1 \\ ip(N_p) = 0 \\ X_p(N_p) = 0 \\ \bar{z}_p(N_p) = z_{in} \end{cases} \quad \text{if } \text{Mrk}_p(0) = 0 \quad (2.17)$$

其中 Mrk_p 为单元中粒子点数目标记函数。

三. 出流条件

和入流相似，假设右侧为出流条件，对于单元点，我们令虚拟单元 $Nx + 1$ 中的单元点始终放在单元中心，输运值为 Nx 单元点输运值，

$$X(Nx + 1) = 0, \quad \bar{z}(Nx + 1) = z(Nx) \quad (2.18)$$

对于粒子点，随着流出，粒子点的总数会减少，当有粒子点 $ip(i) > Nx$ 时，我们将它去掉，并调整序号，

$$\begin{cases} ip(i) = ip(N_p) \\ X_p(i) = X_p(N_p) \\ \bar{z}_p(i) = \bar{z}_p(N_p) \\ N_p = N_p - 1 \end{cases} \quad \text{if } ip(i) > Nx \quad (2.19)$$

四. 固壁反射条件

假设图 2.7 中，左边为固壁，对于单元点有边界条件

$$X(0) = 0, \quad X(-1) = -X(1), \quad \bar{z}(-1) = \bar{z}(1) \quad (2.20)$$

其中 $\bar{z}(0)$ 不做特殊处理。

对于粒子点，边界无法穿透，因此如果有粒子穿越边界，我们将它做反射

$$\begin{cases} \text{tmp} = ip(i) + X_p \\ ip(i) = -\text{floor}(\text{tmp} + 0.5) \quad \text{if } \text{tmp} < 0 \\ X_p(i) = -(\text{tmp} + ip(i)) \end{cases} \quad (2.21)$$

2.2.5 DIP 方法一维伪代码

为了更清晰的演示 DIP 方法的求解过程, 下面我们给出 DIP 方法在一维中的伪代码。其中方框内为求解耗散界面时需要用到的代码。

一维双信息保存方法 (DIP) 伪代码

初始化

```
! 单元点初始化
DO i = 0, Nx
  X(i) = 0
  z(i) = z(i)
ENDDO
! 其中 -0.5 < X(i) ≤ 0.5 为单元内坐标

! 粒子点初始化
Np = Nx
! Np 为粒子点总数, 会因为出流和入流变化
DO i = 0, Np
  ip(i) = i
  Xp(i) = 0
  zp(i) = z(i)
ENDDO
! 其中 Np 为粒子点总数, 会因为出流和入流变化
```

```
DO it = 1, NT ! 时间循环
  Mrk(i) = 0
  Mrkp(i) = 0
! 用来标记第 i 单元中临时的单元点数量和粒子点数量
```

1. 单元点的运动追踪

```
DO i = -1, Nx + 1
  sx = sign(X(i))
  u(i) = (1 - |X|)u(i) + |X|u(i + sx)
  Lx = X(i) + u(i)Δt/Δx,
  X(i) = Lx - floor(Lx + 0.5)
  M(i) = i + floor(Lx + 0.5)
! i 单元点移动到 M 单元
```

2. 单元点的更新

```
IF Mrk(M) = 0 THEN
  X'(M) = X(i)
  z'(M) = z(i)
ELSE
  IF z(i) < z'(M) THEN
    X'(M) = X(i)
    z'(M) = z(i)
  ENDIF
ENDIF
! 多个单元点, 选取 z 值小的点
```

$$\begin{aligned} X'(M) &= (X(i) + \text{Mrk}(M)X'(M))/(\text{Mrk}(M) + 1) \\ \bar{z}'(M) &= (\bar{z}(i) + \text{Mrk}(M)\bar{z}'(M))/(\text{Mrk}(M) + 1) \quad ! \text{ 多个单元点, 进行平均} \\ \text{Mrk}(M) &= \text{Mrk}(M) + 1 \end{aligned}$$

END DO

3. 粒子点的运动追踪

DO $i = 0, Np$

$$\begin{aligned} s_x &= \text{sign}(X_p(i)) \\ \bar{u}_p(i) &= (1 - |X_p|)u(ip) + |X_p|u(ip + s_x) \quad ! \text{ 速度插值} \\ L_x &= X_p(i) + \bar{u}_p(i)\Delta t/\Delta x \\ X_p(i) &= L_x - \text{floor}(L_x + 0.5) \quad ! \text{ i 粒子点新位置} \\ ip(i) &= ip(i) + \text{floor}(L_x + 0.5) \end{aligned}$$

4. 粒子点修正单元点

IF $\text{Mrk}_p(ip) = 0$ THEN

$$X'(ip) = X_p(i)$$

$$\bar{z}'(ip) = \bar{z}_p(i)$$

ELSE

IF $\bar{z}_p(i) < \bar{z}'(ip)$ THEN

$$X'(ip) = X_p(i)$$

$$\bar{z}'(ip) = \bar{z}_p(i) \quad ! \text{ 多个粒子点, 选取 } z \text{ 值小的点}$$

ENDIF

ENDIF

$$\begin{aligned} X'(ip) &= (X_p(i) + \text{Mrk}_p(ip)X'_p(ip))/(\text{Mrk}_p(ip) + 1) \\ \bar{z}'(ip) &= (\bar{z}_p(i) + \text{Mrk}_p(ip)\bar{z}'_p(ip))/(\text{Mrk}_p(ip) + 1) \quad ! \text{ 多个粒子点, 取平均} \end{aligned}$$

$$\text{Mrk}_p(ip) = \text{Mrk}_p(ip) + 1$$

END DO

5. 在空单元生成单元点

DO $i = 0, Nx$ IF $\text{Mrk}(i) + \text{Mrk}_p(i) = 0$ THEN

$$L_x = -u(i)\Delta t/\Delta x$$

$$M = i + \text{floor}(L_x + 0.5)$$

$$X'(i) = 0$$

$$\bar{z}'(i) = \bar{z}(M)$$

! 回溯生成单元点

$$L_1 = |X'(i+1) + 1|$$

$$L_2 = |X'(i-1) - 1|$$

$$\bar{z}'(i) = (\bar{z}'(i+1)/L_1 + \bar{z}'(i-1)/L_2)/(1/L_1 + 1/L_2)$$

ENDIF

END DO

DO $i = 0, Nx$

$$\bar{z}(i) = \bar{z}'(i)$$

$$X(i) = X'(i)$$

$$z(i) = \bar{z}(i)$$

END DO

2.2.6 二维 DIP 方法

粒子方法具有极好的高维拓展性, 我们只需要增加 Y 方向的位置函数即可求解二维问题。下面以单元点为例简单的介绍下 DIP 方法求解二维方程 (2.22) 的实现过程, 详细内容可见附录。

$$\frac{\partial z}{\partial t} + u \frac{\partial z}{\partial x} + v \frac{\partial z}{\partial y} = 0 \quad (2.22)$$

一. 初始化

初始化除了维度增加以外完全和一维相同:

$$X(i, j) = 0, \quad Y(i, j) = 0, \quad \bar{z}(i, j) = z(i, j) \quad (2.23)$$

二. 单元点的运动追踪

首先通过一维线性插值的方式得到单元点速度:

$$\begin{cases} \bar{u}(i, j) = (1 - |X|)u(i, j) + |X|u(i + s_x, j) \\ \bar{v}(i, j) = (1 - |Y|)v(i, j) + |Y|v(i, j + s_y) \end{cases} \quad (2.24)$$

为了表达简单, 在不引起混淆的情况下将 $X(i, j)$ 和 $Y(i, j)$ 简写为 X 和 Y 。其中

$$\begin{cases} s_x = \text{sign}(X) \\ s_y = \text{sign}(Y) \end{cases}$$

临时坐标变化:

$$\begin{cases} L_x = X(i, j) + \bar{u}(i, j)\Delta t/\Delta x \\ L_y = Y(i, j) + \bar{v}(i, j)\Delta t/\Delta y \end{cases}$$

所在单元变化和相对坐标变化为

$$\begin{cases} M(i, j) = i + \text{floor}(L_x + 0.5) \\ N(i, j) = j + \text{floor}(L_y + 0.5) \\ X(i, j) = L_x - \text{floor}(L_x + 0.5) \\ Y(i, j) = L_y - \text{floor}(L_y + 0.5) \end{cases}$$

三. 单元点的更新

单元点的更新过程和一维中相同，其中耗散型界面的单元点生成仍采用临近单元单元点加权平均的形式，

$$\bar{z}(i, j) = \sum_{i_1, j_1} [\omega_{i_1, j_1} \bar{z}(i + i_1, j + j_1)] / \sum_{i_1, j_1} \omega_{i_1, j_1}$$

其中 $i_1 = -1, 1$, $j_1 = -1, 1$ 。权重函数反比于距离， $\omega_{i_1, j_1} = 1/L_{i_1, j_1}$ ，而距离很容易求得为：

$$L_{i_1, j_1} = \sqrt{(X(i + i_1, j + j_1) + i_1)^2 + (Y(i + i_1, j + j_1) + j_1)^2}$$

2.3 数值算例

下面我们将通过一维和二维算例验证新方法的表现。

2.3.1 一维数值算例

1. 均匀速度场算例

对于均匀速度场，粒子点和单元点是完全重合的，信息点间的距离不会变化，所以不会有一个单元存在多个单元点或是没有单元点的情况出现。

1). 首先测试一个间断函数在 $u = 1$ 的均匀速度场中传播的问题。初始条件为

$$z = \begin{cases} 1, & \text{if } x < 0.2 \\ 0, & \text{if } x \geq 0.2 \end{cases}$$

计算域为 $[0, 1]$ ，采用周期边界条件。计算网格为 $N = 20$ ，时间步长设定为 $\Delta t = 0.005$ ，图 2.13 给出 23 个时间步后单元点的分布情况。从该算例可以看出，粒子类方法由于对于运动追踪的连续性，即便在极其稀疏的网格中，也能准确得到每个信息点上的信息。

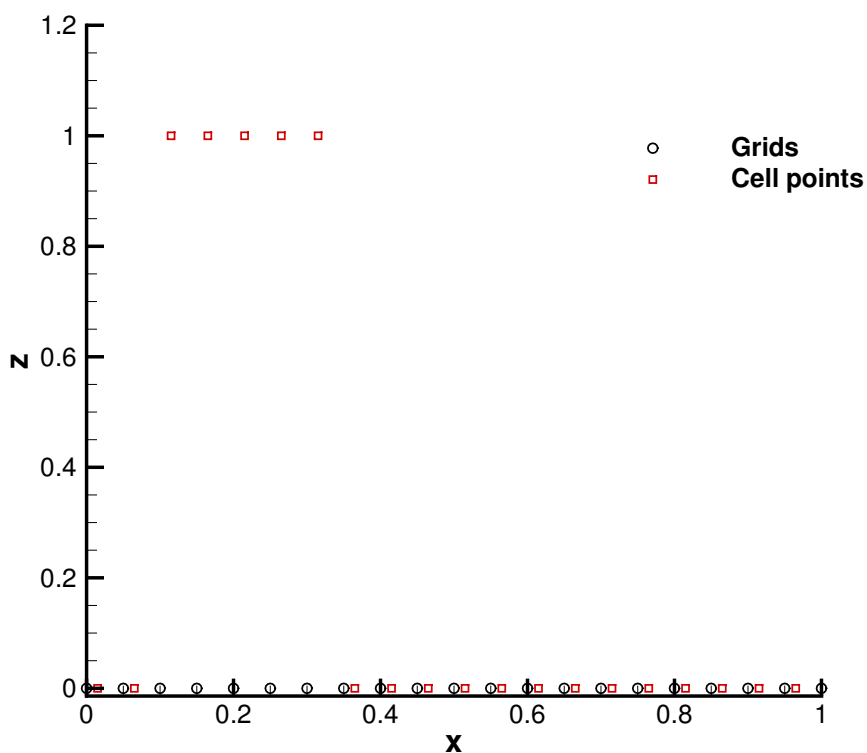


图 2.13: 一维线性对流间断传播算例, 均匀速度场 $u = 1$, 时间步 $Nt = 23$

2). 接下来研究更复杂波形的传播, 初始条件为

$$z_0(x) = \begin{cases} \frac{1}{6} (G(x, \beta, z - \delta) + G(x, \beta, z + \delta) + 4G(x, \beta, z)), & -0.8 \leq x \leq -0.6 \\ 1, & -0.4 \leq x \leq -0.2 \\ 1 - |10(x - 0.1)|, & 0 \leq x \leq 0.2 \\ \frac{1}{6} (F(x, \alpha, a - \delta) + F(x, \alpha, a + \delta) + 4F(x, \alpha, a)), & 0.4 \leq x \leq 0.6 \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.25)$$

其中函数 G 和 F 为

$$G(x, \beta, z) = \exp(-\beta(x - z)^2)$$

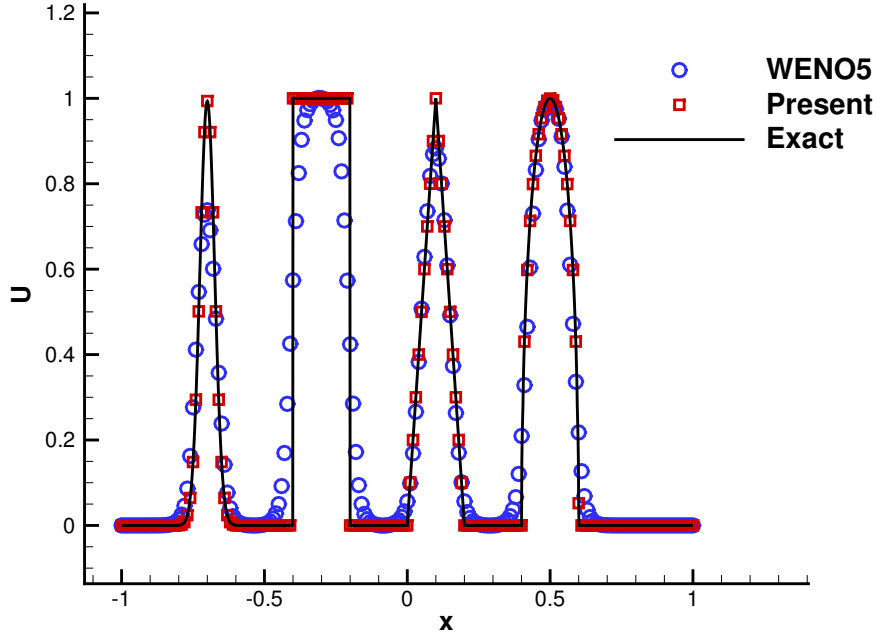


图 2.14: 一维对流方程组合波算例, 不同计算方法计算结果比较, 均匀速度场 $u = 1$, $T = 6$

$$F(x, \gamma, a) = \sqrt{\max(1 - \alpha^2(x - a^2), 0)}$$

其中 $a = 0.5$, $z = -0.7$, $\delta = 0.05$ 和 $\beta = \log 2 / 36\delta^2$ 。计算采用 $N = 200$ 的网格, 计算时间为 $T = 6$ 。我们将新方法的计算结果和采用了 WENO 格式的有限差分方法计算进行对比, 从图 2.14 可以看出, 对于该类线性问题, 无论解中含有间断的波形还是光滑的波形都能通过 DIP 方法准确模拟。

2. 无粘 Burgers 方程问题

无粘 Burgers 方程为

$$\frac{\partial z}{\partial t} + z \frac{\partial z}{\partial x} = 0, \quad z_0(x) = \sin(\pi x), \quad 0 \leq x \leq 2 \quad (2.26)$$

由于速度场设定为 $u = z$, 因此方程 (2.26) 是非线性方程。对于该方程, 原本光滑的波形经过一段时间后会发展出间断。图 2.15 给出 DIP 方法和 WENO 格式在 $N = 200$ 网格下的计算结果, 通过对比可以看到, 对于非线性问题,

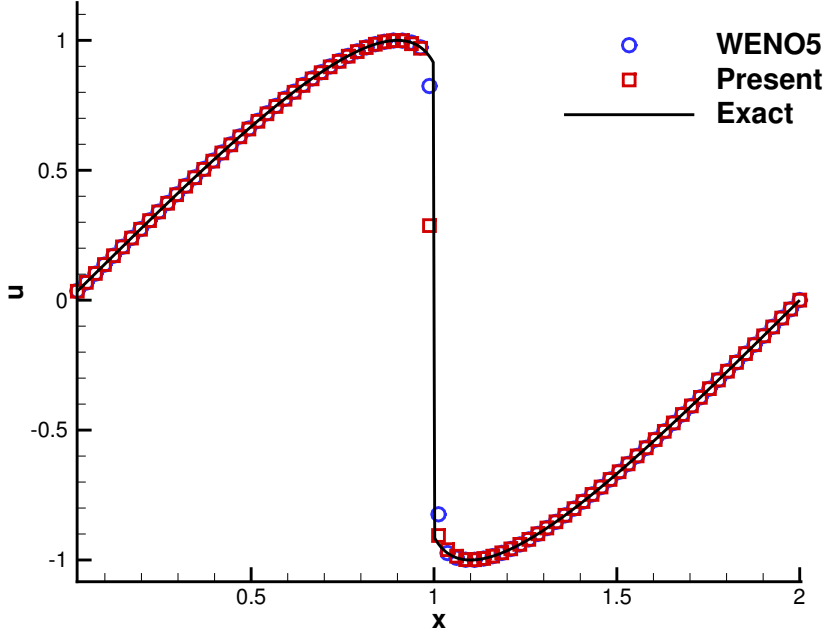


图 2.15: Bugers 方程算例, $T = 0.4$

DIP 方法同样可以进行模拟, 并取得很好的计算结果, 另外也可以说明, DIP 方法可以模拟传统界面的生成过程。

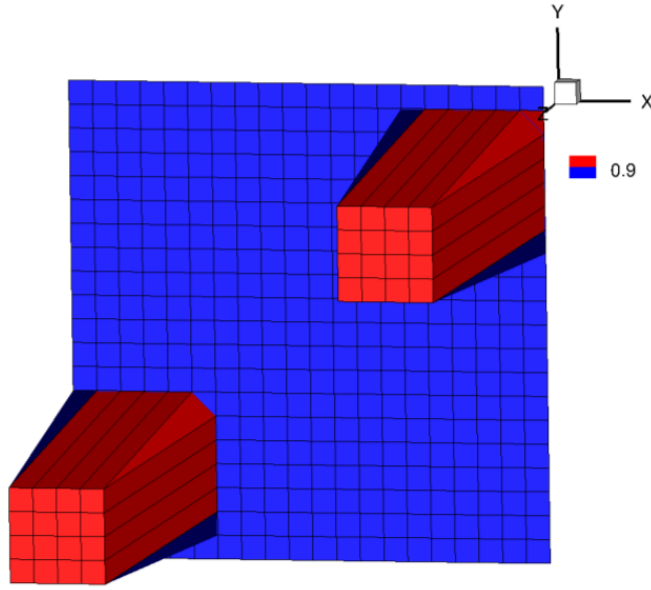
2.3.2 二维数值算例

二维问题中存在复杂的拓扑变化, 更适合用来测试界面方法的表现, 下面我们测试 DIP 方法在均匀速度场、旋转速度场等不同速度场下的算例。

1. 均匀速度场算例

该算例采用 $u = 1, v = 1$ 的均匀速度场, 计算区域为 $[0, 1] \times [0, 1]$ 初始时刻一个边长为 0.2 的正方形中心位于 $(0.2, 0.2)$, 正方形内 $z = 1$ 其它区域 $z = 0$, 计算网格采用极为稀疏的 20×20 , 计算时间为 $t = 0.6$ 。从图 2.16 中给出的计算结果可以看到, 即便在极其稀疏网格下, DIP 方法仍然能准确的计算每一个单元点的运动。

2. Zalesak 圆盘旋转算例

图 2.16: 二维均匀速度场算例, $T = 0.6$

Zalesak 的圆盘旋转算例 [324] 是一个验证界面方法的经典算例, 速度场采用旋转速度场

$$\begin{cases} v_x(x, y) = 2\pi y \\ v_y(x, y) = -2\pi x \end{cases}$$

初始条件为

$$u(x, y) = \begin{cases} 0, & \sqrt{x^2 + y^2} > 0.4 \\ 0, & 0.4 < y < 0.6 \text{ and } x > 0.5 \\ 1, & \text{else} \end{cases}$$

该问题中计算域为 $[0.1] \times [0, 1]$, 采用 $N = 200 \times 200$ 网格。图 2.17 给出不同时刻的计算结果 ($T_1 = 0, T_2 = 0.25, T_3 = 0.5, T_4 = 0.75, T_5 = 1$ 和 $T_6 = 20$), 从图中可以看出, 即便经过很长时间的旋转, DIP 方法仍可以很好保持圆盘的形状。

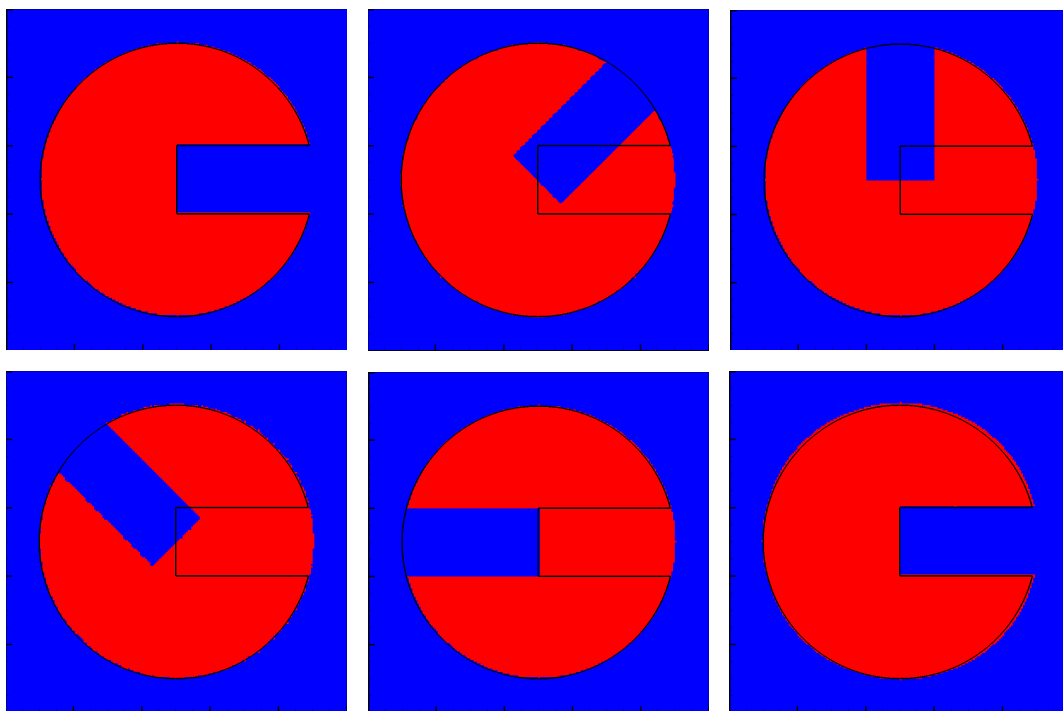


图 2.17: Zalesak 圆盘旋转算例, $N = 200 \times 200$ 网格下计算结果 ($T_1 = 0$, $T_2 = 0.25$, $T_3 = 0.5$, $T_4 = 0.75$, $T_5 = 1$ 和 $T_6 = 20$), 其中黑线为初始条件

3. 界面拉伸算例

下面考虑另外一个常用来测试界面方法的算例 [14, 217], 在计算开始, 一个半径为 0.2 的圆, 圆心位于 $(0.5\pi, 0.7)$,

$$u(x, y) = \begin{cases} 1, & \sqrt{(x - 0.5\pi)^2 + (y - 0.7)^2} \leq 0.2 \\ 0, & \text{else} \end{cases}$$

速度场为

$$\begin{cases} v_x(x, y) = \cos(x - 0.5\pi)\sin(y - 0.5\pi) \\ v_y(x, y) = -\sin(x - 0.5\pi)\cos(y - 0.5\pi) \end{cases}$$

在该速度场作用下, 界面会被不断拉伸, 在一段时间的运动后采取逆速度场, 通过圆是否回到初始位置来判断界面方法的守恒性。

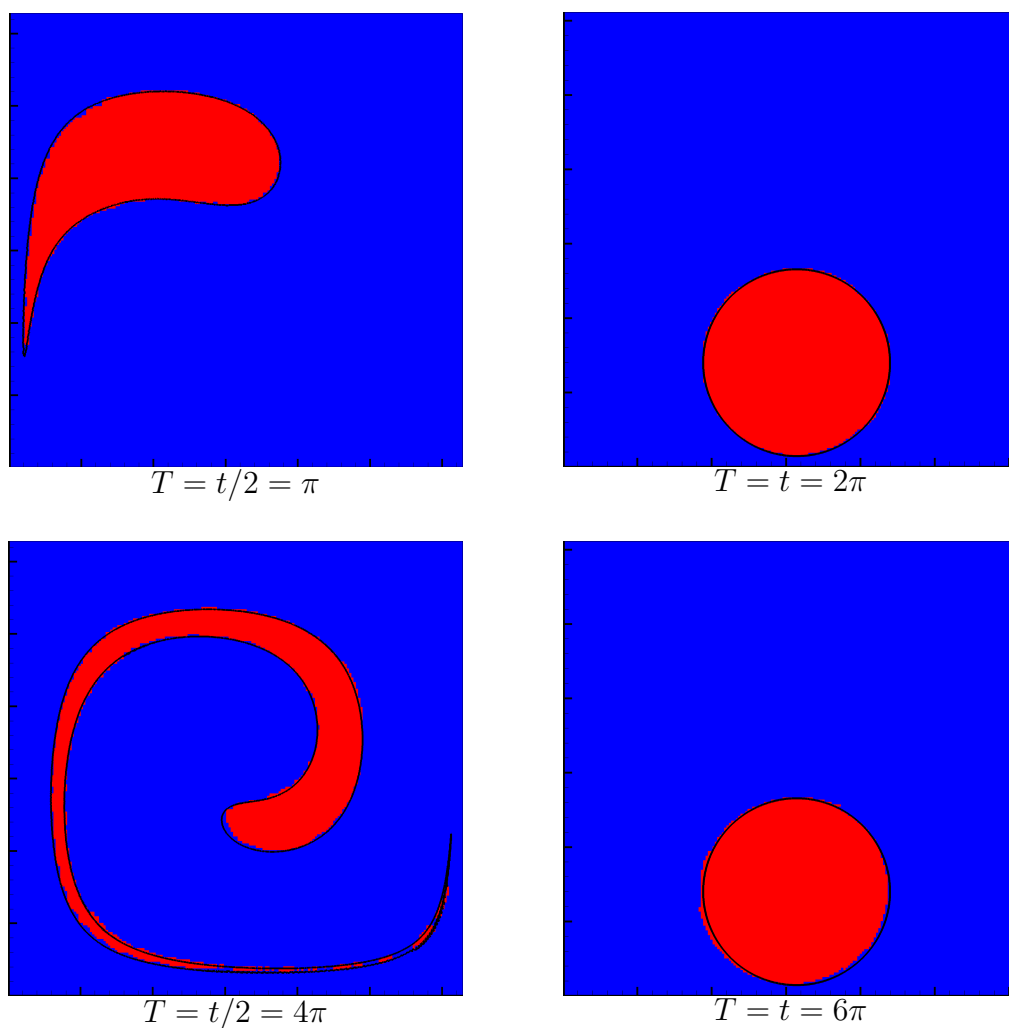
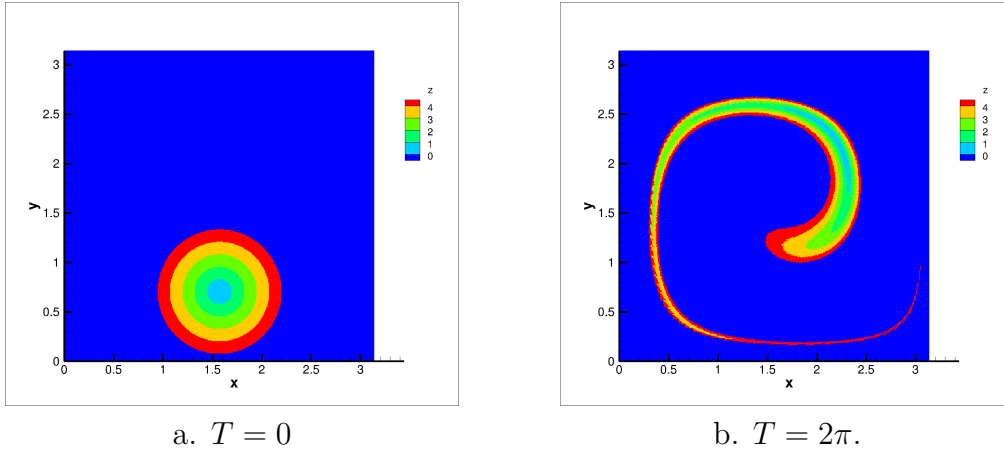


图 2.18: 界面拉伸算例, $N = 200 \times 200$, 其中黑线为参考解

图 2.18 中给出了 $N = 200 \times 200$ 网格下计算结果, 分别为 $T = \pi$ 结果和继续反向运动 π 的结果, $T = 2\pi$ 的结果和继续反向运动 2π 的结果, 可以看到新方法可以很好的计算界面的拉伸变化, 并保持守恒性。

4. 多相界面问题

1). 前文指出, 现有的界面方法在求解含有三相和三相以上物质的问题时较为困难, 这里我们构造一个和上一个界面拉伸算例相似, 但是含有多相界面的新算例, 该算例仍采用相同的速度场和其它计算条件, 只是初始条

图 2.19: 多相界面拉伸算例, $N = 400 \times 400$

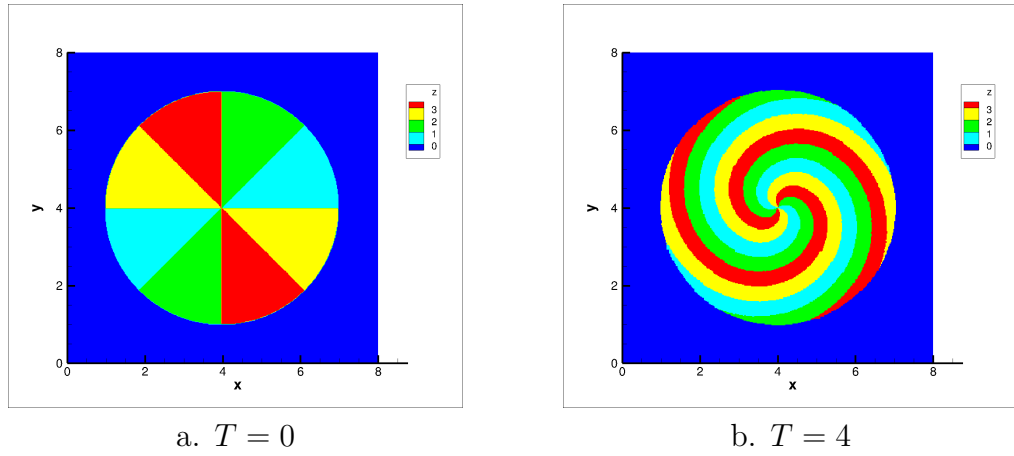
件变为

$$z_0 = \begin{cases} 1, & \text{if } r < 1/5 \\ 2, & \text{if } 1/5 \leq r < 2/5 \\ 3, & \text{if } 2/5 \leq r < 3/5 \\ 4, & \text{if } 3/5 \leq r < 4/5 \\ 5, & \text{if } 4/5 \leq r < 1 \\ 0, & \text{else} \end{cases}$$

初始分布如图 2.19.a 所示, 图 2.19.b 给出 $T = 2\pi$ 时间后界面运动结果, 可以看到, 由于 DIP 方法针对于物理方程本身求解, 因此可以毫无区别的模拟多相界面和两相界面问题。

2). 我们继续模拟另外一个有趣的多相界面算例, 该算例模拟的是一个彩色圆盘旋转问题, 计算域选取为 $[-2, 2] \times [-2, 2]$, 初始条件为

$$z_0 = \begin{cases} 1, & \text{if } x > y \text{ and } \text{sign}(x) = \text{sign}(y) \text{ and } r \leq 3 \\ 2, & \text{if } x \leq y \text{ and } \text{sign}(x) = \text{sign}(y) \text{ and } r \leq 3 \\ 3, & \text{if } |x| < |y| \text{ and } \text{sign}(x) \neq \text{sign}(y) \text{ and } r \leq 3 \\ 4, & \text{if } |x| \geq |y| \text{ and } \text{sign}(x) \neq \text{sign}(y) \text{ and } r \leq 3 \\ 0, & \text{else} \end{cases}$$

图 2.20: 多相界面旋转算例, $N = 400 \times 400$

速度场为

$$\begin{cases} u = y\sqrt{x^2 + y^2} \\ v = -x\sqrt{x^2 + y^2} \end{cases}$$

图 2.20.a 给出初始状态, 经过 $T = 4$, 图 2.20.b 中显示, 彩色圆盘由于中心旋转速度快, 边缘速度慢, 因而被拉伸成细长的条带。对于这种界面极度拉伸问题, DIP 方法也可以很好的求解。

2.4 小结

本章中, 我们构造了一种基于欧拉网格的粒子类方法求解线性对流方程, 在该方法中同时引入两类携带有对流方程输运值的 Lagrangian 粒子—信息点, 一类信息点在单元内运动, 每一步都会重新生成用以保持信息点全域覆盖, 称为单元点, 另一类全域追踪, 用来修正单元点由于生成过程而产生的误差, 称为粒子点。该方法由于针对于对流方程本身求解, 可以很好的处理传统的两相界面、多相界面及耗散界面问题。本章给出了该方法详细的构造过程, 并通过一系列算例验证了该方法的有效性和鲁棒性。我们将在第??章进一步验证新方法在计算耗散界面时的表现。

第三章 刚性常微分方程和数值摄动 (NP) 方法

在本文第??、??章中，会遇到求解刚性 ODE 方程的问题。在前言 ?? 中曾对时间刚性问题进行过分析和探讨。采用分裂方法，时间刚性集中体现在 ODE 方程求解中，是一个较为独立的数学问题，因此，在本章中我们预先分析该问题，并设计相应的数值方法进行处理，在后面的章节中将不做过多的探讨。

3.1 刚性常微分 (ODE) 方程

在各个学科领域都广泛的存在着如下形式的常微分方程

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x), x(0) = x_0, (x \in \mathbb{R}^s, t \leq 0) \quad (3.1)$$

对于该类方程的理论及数值研究已经长达两个世纪，随着如 Runge-Kutta 等高精度单步格式的提出，该方程基本上已经不存在求解难题。然而却有一个问题是例外，那就是刚性方程 (Stiff equation) 问题。

刚性方程在 ODE 数值方法发展中犹如一块乌云，甚至至今连明确的数学定义都没有 [308]。学者们给出了刚性方程多种描述，目前接受最广泛的仍然是 1985 年 Curtiss 和 Hirschfelder 最早给出的描述：刚性方程是指那些采用某些特定的隐式格式求解，尤其是采用 BDF 格式，会比采用显式格式求解有优势，通常都有极大的优势，的一类方程（‘stiff equations are equations where certain implicit method, in particularly BDF, perform better, usually tremendously better, than explicit ones’）。

刚性和非刚性方程求解起来差别巨大，比如采用显式格式求解刚性 ODE 方程，需要极小的时间步才能稳定，相反的，如果采用隐式格式求解非刚性 ODE 方程，又因为复杂的迭代同样会造成计算效率低下。如何能协调这一对矛盾，一直困扰着 ODE 数值方法的发展。E.Hairer 和 G.Wanne 在关于 ODE 方程的经典教材 [117, 308] 中，直接将刚性问题解法和非刚性问题解法分成两册分别讲述，但是由于刚性方程没有明确的定义，很难区分哪些 ODE 方程是刚性的哪些是非刚性的，同时，刚性也是会随时间发展变化的，刚性方程本身刚性的大小也难以界定。因此。即便对于存在刚性的方程也不一定采用隐式格式进行求

解。例如对于化学反应 ODE 方程，其中某些组分的时间尺度很小，存在较大的刚性。但是另一方面，刚性所在的区域相对计算区域而言很小，另外考虑到化学反应方程组特征矩阵巨大，隐式求解会存在着复杂的矩阵运算，计算量并不一定降低，也难以采用高精度的隐式格式等问题，多数学者目前仍更愿意采用显式格式在充分小的时间步内进行求解。

如前言中所讨论的，目前除刚性稳定的隐式格式和刚性不稳定的显式格式外，也有一些格式一定程度上能兼顾刚性和非刚性的求解要求，例如，线化梯形公式 (LT) [305, 334]，该方法具有二阶精度、显式形式和一定程度的刚性稳定性，因而在如化学反应这种即存在刚性和非刚性又由于特征矩阵巨大而难以采用隐式格式求解的方程中得到较多的应用。然而，线化梯形公式也仅仅具有二阶精度，在非刚性的区域精度不足，另外，该方法也非绝对的刚性稳定的，刚性过大仍然会出现计算问题。

由上面分析可以看出，如果能找到或者构造一种高精度的、刚性稳定且具有显形式的格式对于处理例如化学反应等可能存在刚性 ODE 方程的问题，尤为重要。在本章中，我们基于 Gao 数值摄动的思想 [98, 254, 338]，构造了针对于 ODE 方程 (3.1) 的数值摄动格式。并通过理论分析和数值计算验证了该类方法的效果。

3.2 数值摄动 (NP) 方法

数值摄动方法是 Gao 提出和发展的一种通过对低阶格式中的系数进行小参数摄动来构造高阶微分方程数值格式的方法，目前主要用来求解对流-耗散型方程如 NS 方程，包括摄动有限差分方法 [353, 359] 和摄动有限体积方法 [360]。

数值摄动方法的基本过程是：将低阶格式（如一阶迎风格式、二阶中心格式）中的某些系数用网格长度的幂次多项式代替；通过微分方程本身（如对流扩散方程）得到更高阶的微分关系；确定幂次多项式中的参数用来消除重新构造的格式中各阶截断误差。这样就可以得到各阶的数值摄动格式。

下面我们基于相同的思想构造求解方程 (3.1) 的数值摄动 (NP) 方法。

对于该方程，一阶显示欧拉格式为

$$x_{n+1} - x_n = \Delta t f(t, x_n) \quad (3.2)$$

我们将它作为构造数值摄动方法的基本格式，对其泰勒展开，可以得到

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x) - \frac{1}{2}\Delta t \frac{d^2x}{dt^2} - O(\Delta t^2) \quad (3.3)$$

和对流方程构造数值摄动方法 [98, 338] 相同，我们在方程 (3.2) 左侧引入一个摄动多项式 p ，格式变为

$$p(x_{n+1} - x_n) = \Delta t f(t, x_n) \quad (3.4)$$

其中的幂次多项式 p 为

$$p = 1 + \sum_{i=1}^{\infty} a_i \Delta t^i \quad (3.5)$$

将公式 (3.5) 带入公式 (3.4) 并且对其泰勒展开有

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x) - \left(\frac{1}{2} \frac{d^2x}{dt^2} + a_1 \frac{dx}{dt} \right) \Delta t - \left(\frac{1}{6} \frac{d^3x}{dt^3} + \frac{a_1}{2} \frac{d^2x}{dt^2} + a_2 \frac{dx}{dt} \right) \Delta t^2 + O(\Delta t^4) \quad (3.6)$$

从中可以看出，如果我们令方程右端第二项为零，即

$$\frac{1}{2} \frac{d^2x}{dt^2} + a_1 \frac{dx}{dt} = 0 \quad (3.7)$$

格式 (3.4) 具有二阶精度。同样的方法，我们可以通过消除右端更多项来构造更高阶格式。公式 (3.6) 中二阶导数，及其它高阶导数都可以直接通过原方程 (3.1) 求得，

$$\frac{dx}{dt} = f \frac{d^2x}{dt^2} = f'_t + f'_x f \dots$$

因此，我们可以通过所需要构造的格式精度推导出摄动系数 a_1, a_2, \dots ,

$$a_1 = -\frac{f'_t + f'_x f}{2f}$$

$$a_2 = \frac{-2f(f''_{tt} + 2f''_{tx}f + f'_x f'_t + f'_x f'_x f + f''_{xx}f^2) + 3(f'_t + f'_x f)^2}{12f^2}$$

$$\dots$$

如果 f 仅是 x 的函数, 则 a_i 可以简化为

$$a_1 = -\frac{f'}{2} \quad a_2 = \frac{1}{12}f'^2 - \frac{1}{6}f''f \quad \dots \quad (3.8)$$

方程 (3.1) 的 N 阶数值摄动格式可以写为

$$x_{n+1} = x_n + \Delta x f(t, x_n)/p_N \quad (3.9)$$

其对应的摄动多项式可以记作

$$p_N = 1 + \sum_{i=1}^{N-1} a_i \Delta t^i$$

我们对三阶 NP (3NP) 格式进行进一步的变形, 用来提高它的稳定性, 三阶变形 NP (3TNP) 格式的摄动多项式为

$$\bar{p}_3 = \frac{1 + b_1 \Delta t + b_2 \Delta t^2}{1 - b_2 \Delta t} \quad (3.10)$$

其中 \bar{p}_3 应该是 p_3 的二阶近似, 有

$$b_1 = a_1 - \frac{a_2}{a_1 + 1}, \quad b_2 = \frac{a_2}{a_1 + 1} \quad (3.11)$$

新的三阶变形 NP 格式同样具有三阶精度, 且较原有的三阶 NP 格式更稳定, 关于稳定性将在下一节进行分析。

3.3 NP 格式的稳定性分析

在前面刚性方程介绍中, 曾提到, 对于刚性方程的算法, 稳定性是最重要的, 因此我们验证一种方法是否适合求解刚性问题, 首先要分析它的刚性稳定性 [251]。

对于格式刚性稳定性的分析, 首先要分析其线性稳定性, 线性稳定性一般通过 A 稳定性及强 A 稳定性来判定, 关于线性稳定性, 我们将在下面的线性方程 (3.12) 中进行分析,

$$x' = qx, \operatorname{Re}(q) < 0 \quad (3.12)$$

采用某一方法对方程 (3.12) 离散后可以统一写成:

$$x_{n+1} = E(h)x_n \quad (3.13)$$

其中 $h = q\Delta t$ 。在 (3.13) 的基础上, 我们可以给出 A 稳定性和强 A 稳定性的定义:

定义 1 (A 稳定). 根据 *Dahlquist* [67] 的分析, 关于离散方程 (??) 如果对于任何的实部为负的复数 h 都有 $|E(h)| < 1$, 则认为该格式为 A 稳定的。

定义 2 (强 A 稳定). 如果一个格式是 A 稳定的同时又满足 $\lim_{\text{Re}(h) \rightarrow -\infty} |E(h)| = 0$, 则认为该格式是强 A 稳定的。

在分析 NP 格式的线性稳定性前, 我们先给出一些求解 ODE 方程常用的格式, 尤其是常用在求解化学反应 ODE 方程中的格式, 用来和 NP 格式进行对比, 它们分别是一阶显式欧拉格式 (1EE)、一阶隐式欧拉格式 (1IE)、二阶线化梯形公式 (2LIE) 和三阶显式 Runge-Kutta (3RK) 格式。

(1) 一阶显式欧拉格式

$$x_{n+1} - x_n = \Delta t f(t, x_n) \quad (3.14)$$

$$E^{1\text{EE}}(h) = 1 + h \quad (3.15)$$

(2) 一阶隐式欧拉格式

$$x_{n+1} - x_n = \Delta t f(t, x_{n+1}) \quad (3.16)$$

$$E^{1\text{IE}}(h) = \frac{1}{1 - h} \quad (3.17)$$

(3) 二阶线化梯形公式 [305, 334]

$$x_{n+1} - x_n = \frac{\Delta t f(t, x_n)}{1 - 1/2 \Delta t f'_x(t, x_n)} \quad (3.18)$$

$$E^{2\text{LIE}}(h) = \frac{1 + \frac{1}{2}h}{1 - \frac{1}{2}h} \quad (3.19)$$

需要注意的是求解线性方程 (3.12) 时, 二阶线化梯形公式具有和二阶 NP 格式相同的形式。

(4) 三阶显式 Runge-Kutta 格式

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + \frac{1}{4}k_1 + \frac{3}{4}k_3 \\ k_1 &= \Delta t f(t_n, x_n) \\ k_2 &= \Delta t f(t_n + \frac{1}{3}\Delta t, x_n + \frac{1}{3}k_1) \\ k_3 &= \Delta t f(t_n + \frac{2}{3}\Delta t, x_n + \frac{2}{3}k_2) \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$E^{3\text{RK}}(h) = 1 + h + \frac{1}{2}h^2 + \frac{1}{6}h^3 \quad (3.21)$$

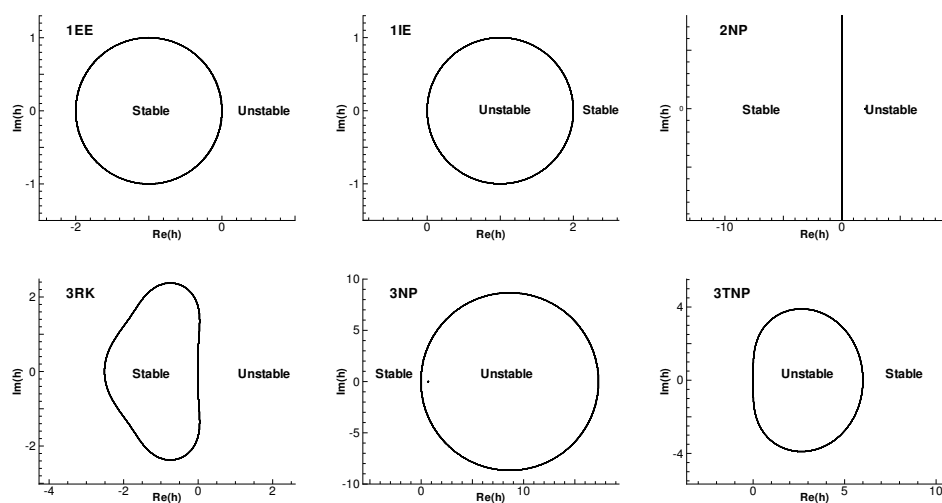
对于方程 (3.12), 很容易求得摄动系数为 $a_1 = -\frac{1}{2}q$, $a_2 = \frac{1}{12}q^2$, \dots . 因此 NP 格式的 $E(h)$ 函数分别为

$$\begin{aligned} E^{2\text{NP}}(h) &= \frac{1 + \frac{1}{2}h}{1 - \frac{1}{2}h} \\ E^{3\text{NP}}(h) &= \frac{1 + \frac{1}{2}h + \frac{1}{12}h^2}{1 - \frac{1}{2}h + \frac{1}{12}h^2} \\ E^{3\text{TNP}}(h) &= \frac{1 + \frac{1}{3}h}{1 - \frac{2}{3}h + \frac{1}{6}h^2} \end{aligned}$$

图 3.1 给出不同格式在 h 复平面的稳定区域, 图中可以看出, 一阶隐式欧拉格式、二阶 NP 格式、三阶 NP 格式和三阶变形 NP 格式都是 A 稳定的, 其中变形 NP 格式较三阶 NP 格式具有更大的稳定区域。只有三阶变形 NP 格式和一阶隐式欧拉格式是强 A 稳定的。

3.4 不同格式的数值比较

由于理论方法的限制, 我们仅能比较不同格式的线性稳定性, 而求解非线性方程是否稳定, 我们只能通过数值的方法进行验证。

图 3.1: 不同格式在 h 复平面上稳定区域

算例 1). 首先我们研究如下方程 [117]

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x) = -50(x - \cos t) \quad (3.22)$$

针对该方程, 摄动系数为

$$a_1 = 25 - \frac{\sin t_n}{2(x_n - \cos t_n)}, \quad a_2 = \frac{1}{4} \left(\frac{\sin t_n}{x_n - \cos t_n} - 50 \right)^2 - \frac{\cos t_n - 50 \sin t_n}{6(x_n - \cos t_n)}$$

图 3.2 给出不同方法的求解结果。可以看到, 一阶显式欧拉格式和三阶 Runge-Kutta 格式正如前面线性分析的结果一样是不稳定的, 二阶 NP 格式也有一个点过冲。只有三阶 NP 格式、三阶 TNP 格式和一阶隐式欧拉格式是稳定的, 而一阶隐式欧拉格式精度远远不如三阶 NP 和 TNP 格式。另外需要注意的是, 尽管隐式格式能得到稳定的结果, 然而在每一步都需要迭代。

算例 2). 方程

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x) = -x^3, x_0 = 1, t = [0, 1] \quad (3.23)$$

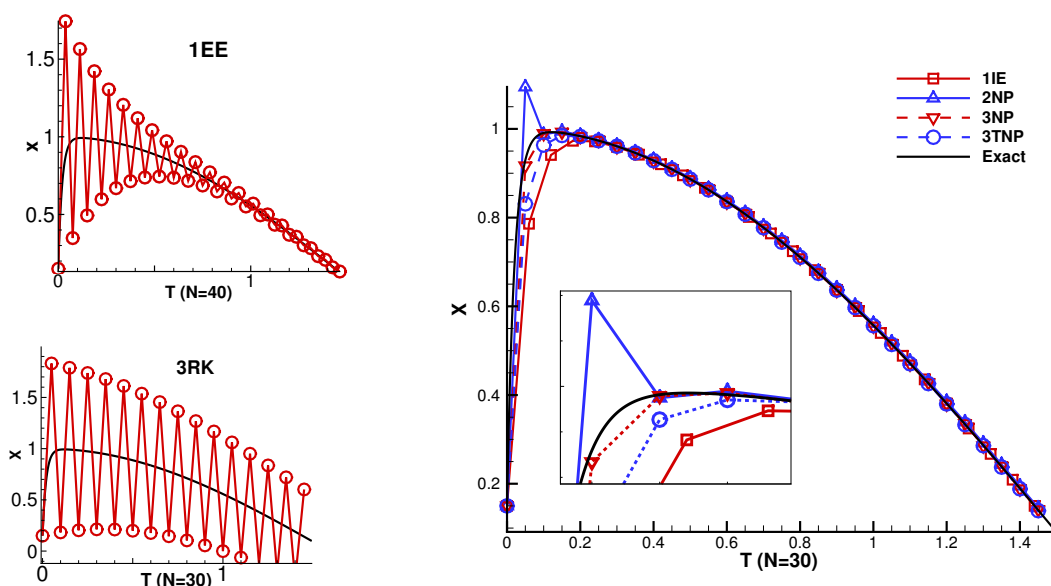


图 3.2: 不同格式求解 ODE 方程 (3.22) 结果. 参考解为采用 $N = 3000$ 网格得到

作为第二个算例, 该算例存在精确解

$$x = \frac{1}{\sqrt{2t+1}}$$

同样不难求的摄动系数分别为

$$a_1 = \frac{3x_n^2}{2}, a_2 = -\frac{x_n^4}{4}$$

表 C.1 给出不同方法的误差和计算精度, 可以看到, 二阶 NP 格式、三阶 NP 格式和三阶 TNP 格式都能达到它们理论精度, 而且三阶 NP 和三阶 TNP 格式误差要小于三阶 RK 格式。

3.5 小结

本章, 我们针对 ODE 方程可能存在的刚性问题, 构造了高精度、刚性稳定且具有显式形式的数值摄动 (NP) 格式, 经过理论分析和数值计算, 验证了

表 3.1: 不同 ODE 格式精度分析

Scheme	N	L_1 error	L_1 order	L_∞ error	L_∞ order
1IE	20	7.7149d-3	—	8.7737d-3	—
	40	3.9062d-3	0.98	4.4879d-3	0.97
	80	1.9656d-3	0.99	2.2712d-3	0.98
	160	9.8594d-4	1.00	1.1426d-3	0.99
	320	4.9377d-4	1.00	5.7304d-4	1.00
3RK	20	1.3696d-5	—	1.7438d-5	—
	40	1.6161d-6	3.08	2.0646d-6	3.08
	80	1.9601d-7	3.04	2.5119d-7	3.04
	160	2.4128d-8	3.02	3.0964d-8	3.02
	320	2.9924d-9	3.01	3.8433d-9	3.01
2NP	20	5.0683d-5	—	6.0346d-5	—
	40	1.2338d-5	2.04	1.4812d-5	2.03
	80	3.0414d-6	2.02	3.6679d-6	2.01
	160	7.5487d-7	2.01	9.1226d-7	2.01
	320	1.8803d-7	2.01	2.2750d-7	2.00
3NP	20	1.9980d-6	—	2.5388d-6	—
	40	2.3999d-7	3.06	3.0629d-7	3.05
	80	2.9376d-8	3.03	3.7628d-8	3.03
	160	3.6325d-9	3.03	4.6607d-9	3.01
	320	4.5143d-10	3.01	5.7972d-10	3.01
3TNP	20	1.8060d-6	—	2.2866d-6	—
	40	2.1766d-7	3.06	2.7702d-7	3.05
	80	2.6685d-8	3.03	3.4085d-8	3.02
	160	3.3025d-9	3.01	4.2255d-9	3.01
	320	4.1057d-10	3.01	5.2582d-10	3.01

该类格式，尤其是三阶 TNP 格式高精度及刚性稳定等性质。再下一章中，我们将会把三阶 TNP 格式应用在化学反应方程求解中，用来解决化学反应 ODE 方程中的时间刚性问题。

Appendix A 化学反应中相关尺度的探讨

尺度在英文中对应于“scale”，而“scale”是一个较常用而且意义宽泛的名词和动词。作为名词，尺度主要包含以下两层含义：

1. 主观的度量，《Cambridge Dictionary》解释为“a set of numbers, amounts, etc., used to measure or compare the level of something”。在本文可以对应于网格尺度、时间步长，是我们主观观察问题所采用的的度的大小。
2. 客观事物特征与变化的空间和时间范围，《Cabridge Dictionary》解释为“the size or level of something”。文中对应于时间尺度、空间尺度和特征尺度等等。

A.1 化学反应时间尺度分析方程和空间尺度分析方程

除了对尺度概念简单的字面理解，在研究中，每种尺度都应该有更明确的数学定义。为了便于理解全文，下面对空间尺度和时间尺度进行简单的分析和解释，更准确、详细的理论工作请参阅 [111, 234]。

各种尺度的分析都是针对如下形式 ODE 方程展开的。

$$\frac{dY_i}{dx} = f_i(Y_1, Y_2, \dots, Y_n) \quad (\text{A.1})$$

对于化学反应时间尺度分析，采用反应 ODE 方程

$$\frac{dz_i}{dt} = \frac{\omega_i}{\rho_i}, \quad i = 1, \dots, ns - 1 \quad (\text{A.2})$$

明显满足方程 (A.1) 的形式，

对于化学反应的空间尺度分析，我们需要对反应 Euler 方程做一些特殊的处理，以一维反应 Euler 方程为例

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = S \quad (\text{A.3})$$

其中

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ E \\ \rho z_1 \\ \rho z_2 \\ \vdots \\ \rho z_{ns-1} \end{pmatrix}, F = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(E + p) \\ \rho z_1 u \\ \rho z_2 u \\ \vdots \\ \rho z_{ns-1} u \end{pmatrix}, S = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \omega_1 \\ \omega_2 \\ \vdots \\ \omega_{ns-1} \end{pmatrix},$$

跨过激波, 如果采用随体坐标, 流体满足如下形式方程

$$\begin{cases} \frac{d}{dx}(\rho u) = 0 \\ \frac{d}{dx}(\rho u^2 + p) = 0 \\ \frac{d}{dx}[u(E + p)] = 0 \\ \frac{d}{dx}(\rho u z_i) = \omega_i, \quad i = 1, \dots, ns - 1 \end{cases}$$

如果假设波前的状态为

$$(\rho, u, p, z_i, E, T) = (\rho_0, D, p_0, z_{i0}, E_0, T_0), \quad i = 1, \dots, ns - 1$$

既可得到爆轰波的 Rankine-Hugoniot 关系

$$\rho u = \rho_0 D \quad (\text{A.4})$$

$$\rho u^2 + p = \rho_0 D^2 + p_0 \quad (\text{A.5})$$

$$E + p = E_0 + p_0 \quad (\text{A.6})$$

$$\frac{dz_i}{dx} = \frac{\omega_i}{\rho_i D}, \quad i = 1, \dots, ns - 1 \quad (\text{A.7})$$

我们可以看到反映化学反应的时间尺度的方程 (A.2) 和空间尺度的方程 (A.7) 非常接近, 实际上仅相差一个爆轰波波速 D 。

A.2 尺度分析 [234]

对方程 (A.2) 进行经典的特征分析, 为了方便我们将方程写为

$$\frac{d\mathbf{y}}{dx} = \mathbf{f}(\mathbf{y})$$

其中 $\mathbf{y} = (Y_1, \dots, Y_n)$, $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_n)$ 。然后, 我们在点 $(x, \mathbf{y}) = (x^*, \mathbf{y}^*)$ 进行线化处理

$$\frac{d\mathbf{y}}{dx} = \mathbf{J} \cdot (\mathbf{y} - \mathbf{y}^*) + \mathbf{b}, \quad \mathbf{y}(x^*) = \mathbf{y}^* \quad (\text{A.8})$$

其中 $\mathbf{J} = \partial f_i / \partial Y_j|_{\mathbf{y}=\mathbf{y}^*}$, 而 \mathbf{b} 为一个常数向量。

然后我们定义一个新量 $\zeta = \mathbf{y} - \mathbf{y}^* + \mathbf{J}^{-1} \cdot \mathbf{b}$, 方程 (A.8) 变为

$$\frac{d\zeta}{dx} = \mathbf{J} \cdot \zeta, \quad \zeta(x^*) = \mathbf{J} \cdot \mathbf{b} \quad (\text{A.9})$$

假设 \mathbf{J} 是 n 维线性无关矩阵, 可以将 \mathbf{J} 特征分解为 $\mathbf{J} = \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{P}^{-1}$, 假设 $\omega = \mathbf{P}^{-1} \cdot \zeta$, 则上式可以化为

$$\frac{d\omega}{dx} = \boldsymbol{\Lambda} \cdot \omega, \quad \omega(x^*) = \mathbf{P}^{-1} \cdot \mathbf{J}^{-1} \cdot \mathbf{b} \quad (\text{A.10})$$

该方程的解为

$$\omega(x) = e^{\boldsymbol{\Lambda}(x-x^*)} \cdot \mathbf{P}^{-1} \cdot \mathbf{J}^{-1} \cdot \mathbf{b} \quad (\text{A.11})$$

第 i 项的当地 $x = x^*$ 特征尺度可以定义为

$$l_i = 1/|\text{Re}(\lambda_i)|, \quad (\text{A.12})$$

对于方程 (A.7) 可以认为 l_i 为 i 组分的当地空间尺度 \mathcal{L}_i , 对于方程 (A.2) 可以认为其为当地时间尺度 \mathcal{T}_i 。同样我们可以定义, 所有组分当地最小特征尺度为当地最佳空间尺度 $\mathcal{L}^{\text{local}}$ 和当地最佳时间尺度 $\mathcal{T}^{\text{local}}$ 。对于组分 i , 全局最小的特征尺度可以定义为该组分的最佳空间尺度 $\mathcal{L}_i^{\text{global}}$ 和最佳时间尺度 $\mathcal{T}_i^{\text{global}}$ 。根据方程 (A.2) 和 (A.7) 关系我们可以推知 $\mathcal{L}_i^{\text{global}} \propto D\mathcal{T}_i^{\text{global}}$ 。由此我们也可以看出时间尺度和空间尺度间复杂的相关性。

Appendix B 二维 DIP 方法伪代码

初始化

```
DO  $i = 0, Nx$ 
  DO  $j = 0, Ny$ 
     $X(i, j) = 0$ 
     $Y(i, j) = 0$  ! 单元点初始化
     $\bar{z}(i, j) = z(i, j)$ 
  ENDDO
ENDDO
 $N_px = Nx, N_py = Ny$  ! 粒子点总数可能变化
DO  $i = 0, Nx$ 
  DO  $j = 0, Ny$ 
     $ip(i, j) = i$ 
     $jp(i, j) = j$ 
     $X_p(i, j) = 0$  ! 粒子点初始化
     $Y_p(i, j) = 0$ 
     $\bar{z}_p(i, j) = z(i, j)$ 
  ENDDO
ENDDO
DO  $it = 1, it$  ! 时间循环
  DO  $i = 0, Nx$ 
    DO  $j = 0, Ny$ 
       $Mrk(i, j) = 0,$ 
       $Mrk_p(i, j) = 0$  ! 记录单元内信息点和单元点数
    END DO
  END DO
```

1. 单元点运动追踪

```
DO  $i = 0, Nx$ 
  DO  $j = 0, Ny$ 
     $s_x = \text{sign}(X(i, j)), s_y = \text{sign}(Y(i, j))$ 
     $\bar{u}(i, j) = (1 - |X|)u(i, j) + |X|u(i + s_x, j)$ 
     $\bar{v}(i, j) = (1 - |Y|)v(i, j) + |Y|v(i, j + s_y)$  ! 插值单元点速度
     $L_x = X(i, j) + \bar{u}(i, j)\Delta t/\Delta x$ 
     $L_y = Y(i, j) + \bar{v}(i, j)\Delta t/\Delta y$  ! 临时相对坐标变化
     $M = i + \text{floor}(L_x + 0.5),$ 
     $N = j + \text{floor}(L_y + 0.5).$ 
     $X(i, j) = L_x - \text{floor}(L_x + 0.5)$  ! 新的所在单元和相对坐标
     $Y(i, j) = L_y - \text{floor}(L_y + 0.5)$ 
```

2. 单元点的更新

```
IF  $Mrk(M, N) = 0$  THEN
   $X'(M, N) = X(i, j)$ 
   $Y'(M, N) = Y(i, j)$ 
   $\bar{z}'(M, N) = \bar{z}(i, j)$ 
ELSE
```

```

    IF  $\bar{z}(i) < \bar{z}'(M)$  THEN
         $X'(M, N) = X(i, j)$ 
         $Y'(M, N) = Y(i, j)$  ! 多个单元点, 选取  $z$  值小的点
         $\bar{z}'(M, N) = \bar{z}(i, j)$ 
    ENDIF
ENDIF

```

$X'(M, N) = [X(i, j) + \text{Mrk}(M, N)X'(M, N)] / [\text{Mrk}(M, N) + 1]$ $Y'(M, N) = [Y(i, j) + \text{Mrk}(M, N)Y'(M, N)] / [\text{Mrk}(M, N) + 1]$! 多个单元点, 进行平均 $\bar{z}'(M, N) = [\bar{z}(i, j) + \text{Mrk}(M, N)\bar{z}'(M, N)] / [\text{Mrk}(M, N) + 1]$
--

```

    Mrk(M, N) = Mrk(M, N) + 1
END DO
END DO

```

3. 粒子点的运动追踪

```

DO  $i = 0, N_px$ 
    DO  $j = 0, N_py$ 
         $s_x = \text{sign}(X_p(i, j)), s_y = \text{sign}(Y_p(i, j))$ 
         $\bar{u}_p(i, j) = (1 - |X_p|)u(ip, jp) + |X_p|u(ip + s_x, J)$  ! 插值粒子点速度
         $\bar{v}_p(i, j) = (1 - |Y_p|)v(ip, jp) + |Y_p|v(ip, jp + s_y)$ 
         $L_x = X_p(i, j) + \bar{u}_p(i, j)\Delta t / \Delta x$  ! 临时相对坐标变化
         $L_y = Y_p(i, j) + \bar{v}_p(i, j)\Delta t / \Delta y$ 
         $ip(i, j) = ip(i, j) + \text{floor}(L_x + 0.5)$ 
         $jp(i, j) = jp(i, j) + \text{floor}(L_y + 0.5)$  ! 新的所在单元和相对坐标
         $X_p(i, j) = L_x - \text{floor}(L_x + 0.5)$ 
         $Y_p(i, j) = L_y - \text{floor}(L_y + 0.5)$ 
    END DO
END DO

```

4. 粒子点修正单元点

```

IF  $\text{Mrk}_p(ip, jp) = 0$  THEN
     $X'(ip, jp) = X_p(i, j)$ 
     $Y'(ip, jp) = Y_p(i, j)$ 
     $\bar{z}'(ip, jp) = \bar{z}_p(i, j)$ 
ELSE
    IF  $\bar{z}_p(i) < \bar{z}'(ip, jp)$  THEN
         $X'(ip, jp) = X_p(i, j)$ 
         $Y'(ip, jp) = Y_p(i, j)$  ! 多个粒子点, 选取  $z$  值小的点
         $\bar{z}'(ip, jp) = \bar{z}_p(i, j)$ 
    ENDIF
ENDIF

```

$X'(ip, jp) = [X_p(i, j) + \text{Mrk}_p(ip, jp)X'(ip, jp)] / [\text{Mrk}_p(ip, jp) + 1]$ $Y'(ip, jp) = [Y_p(i, j) + \text{Mrk}_p(ip, jp)Y'(ip, jp)] / [\text{Mrk}_p(ip, jp) + 1]$! 多个粒子点, 进行平均 $\bar{z}'(ip, jp) = [\bar{z}_p(i, j) + \text{Mrk}_p(ip, jp)\bar{z}'(ip, jp)] / [\text{Mrk}_p(ip, jp) + 1]$
--

```

    Mrk_p(ip, jp) = Mrk_p(ip, jp) + 1
END DO
END DO

END IF
END DO
END DO

```

5. 在空单元生成单元点

@Fortran 程序地址: <https://www.github.com/bfly123/DIP2D>

Appendix C 化学反应不同组分热力学拟合参数

对于热完全气体混合物，气体分子的热力学性质随温度的变化而变化，气体的比热、焓和熵都需要通过实验数据拟合得到，本文使用 JANAF 给出的七系数拟合多项式 [276]，其中第 i 组分气体热力学参数具体表达式为：

$$\frac{C_{p,i}}{R_u} = a_{1,i} + a_{2,i}T + a_{3,i}T^2 + a_{4,i}T^3 + a_{5,i}T^4 \quad (\text{C.1})$$

$$\frac{H_{p,i}}{R_u T} = a_{1,i} + \frac{a_{2,i}}{2}T + a_{3,i}T^2 + a_{4,i}T^3 + a_{5,i}T^4 \quad (\text{C.2})$$

$$\frac{H_{p,i}}{R_u T} = a_{1,i}\ln T + a_{2,i}T + \frac{a_{3,i}}{2}T^2 + \frac{a_{4,i}}{3}T^3 + \frac{a_{5,i}}{4}T^4 + a_{7,i} \quad (\text{C.3})$$

在 JANAF 的拟合系数中，每个组分的拟合参数根据温度分为两个区间，在每个温度区间，本文计算所涉及的气体拟合参数如下表。

表 C.1: 不同 ODE 格式精度分析

组份	a1	a2	a3	a4	a5	a6	a7
H2							
200-1000 K	2.34E+00	7.98E-03	-1.95E-05	2.02E-08	-7.38E-12	-9.18E+02	6.83E-01
1000-5000 K	3.34E+00	-4.94E-05	4.99E-07	-1.80E-10	2.00E-14	-9.50E+02	-3.21E+00
O2							
200-1000 K	3.78E+00	-3.00E-03	9.85E-06	-9.68E-09	3.24E-12	-1.06E+03	3.66E+00
1000-5000 K	3.28E+00	1.48E-03	-7.58E-07	2.09E-10	-2.17E-14	-1.09E+03	5.45E+00
O							
200-1000 K	3.17E+00	-3.28E-03	6.64E-06	-6.13E-09	2.11E-12	2.91E+04	2.05E+00
1000-5000 K	2.57E+00	-8.60E-05	4.19E-08	-1.00E-11	1.23E-15	2.92E+04	4.78E+00
H							
200-1000 K	2.50E+00	7.05E-13	-2.00E-15	2.30E-18	-9.28E-22	2.55E+04	-4.47E-01
1000-5000 K	2.50E+00	-2.31E-11	1.62E-14	-4.74E-18	4.98E-22	2.55E+04	-4.47E-01
OH							
200-1000 K	3.99E+00	-2.40E-03	4.62E-06	-3.88E-09	1.36E-12	3.62E+03	-1.04E-01
1000-5000 K	3.09E+00	5.48E-04	1.27E-07	-8.79E-11	1.17E-14	3.86E+03	4.48E+00
HO2							
200-1000 K	4.30E+00	-4.75E-03	2.12E-05	-2.43E-08	9.29E-12	2.95E+02	3.72E+00
1000-5000 K	4.02E+00	2.24E-03	-6.34E-07	1.14E-10	-1.08E-14	1.12E+02	3.79E+00
H2O							
200-1000 K	4.20E+00	-2.04E-03	6.52E-06	-5.49E-09	1.77E-12	-3.03E+04	-8.49E-01
1000-5000 K	3.03E+00	2.18E-03	-1.64E-07	-9.70E-11	1.68E-14	-3.00E+04	4.97E+00
CH3							
200-1000 K	3.67E+00	2.01E-03	5.73E-06	-6.87E-09	2.54E-12	1.64E+04	1.60E+00
1000-5000 K	2.29E+00	7.24E-03	-2.99E-06	5.96E-10	-4.67E-14	1.68E+04	8.48E+00
CH4							
200-1000 K	5.15E+00	-1.37E-02	4.92E-05	-4.85E-08	1.67E-11	-1.02E+04	-4.64E+00
1000-5000 K	7.49E-02	1.34E-02	-5.73E-06	1.22E-09	-1.02E-13	-9.47E+03	1.84E+01
CO							
200-1000 K	3.58E+00	-6.10E-04	1.02E-06	9.07E-10	-9.04E-13	-1.43E+04	3.51E+00
1000-5000 K	2.72E+00	2.06E-03	-9.99E-07	2.30E-10	-2.04E-14	-1.42E+04	7.82E+00
CO2							
200-1000 K	2.36E+00	8.98E-03	-7.12E-06	2.46E-09	-1.44E-13	-4.84E+04	9.90E+00
1000-5000 K	3.86E+00	4.41E-03	-2.21E-06	5.23E-10	-4.72E-14	-4.88E+04	2.27E+00
HCO							
200-1000 K	4.22E+00	-3.24E-03	1.38E-05	-1.33E-08	4.34E-12	3.84E+03	3.39E+00
1000-5000 K	2.77E+00	4.96E-03	-2.48E-06	5.89E-10	-5.34E-14	4.01E+03	9.80E+00
CH2O							
200-1000 K	4.79E+00	-9.91E-03	3.73E-05	-3.79E-08	1.32E-11	-1.43E+04	6.03E-01
1000-5000 K	1.76E+00	9.20E-03	-4.42E-06	1.01E-09	-8.84E-14	-1.40E+04	1.37E+01
N2							
200-1000 K	3.30E+00	1.41E-03	-3.96E-06	5.64E-09	-2.44E-12	-1.02E+03	3.95E+00
1000-5000 K	2.93E+00	1.49E-03	-5.68E-07	1.01E-10	-6.75E-15	-9.23E+02	5.98E+00

参考文献

- [1] AGARWAL, R., AUGUSTINUS, J., AND HALT, D. A comparative study of advection upwind split (ausm) and wave/particle split (wps) schemes for fluid and mhd flows. In *AIAA 30th Plasmadynamics and Lasers Conference, AIAA Paper, Norfolk, VA* (1999), pp. 99–3613.
- [2] AKBAR, R. Mach reflection of gaseous detonations.
- [3] ALLAIRE, G., CLERC, S., AND KOKH, S. A five-equation model for the simulation of interfaces between compressible fluids. *Journal of Computational Physics* 181, 2 (2002), 577–616.
- [4] AMSDEN, A. A., AND HARLOW, F. H. The smac method: A numerical technique for calculating incompressible fluid flows. Tech. rep., Los Alamos Scientific Lab., N. Mex., 1970.
- [5] ANDERSON, D., AND MCFADDEN, G. B. A diffuse-interface description of internal waves in a near-critical fluid. *Physics of Fluids* 9, 7 (1997), 1870–1879.
- [6] ANDERSON, M., VOROBIEFF, P., TRUMAN, C., CORBIN, C., KUEHNER, G., WAYNE, P., CONROY, J., WHITE, R., AND KUMAR, S. An experimental and numerical study of shock interaction with a gas column seeded with droplets. *Shock Waves* 25, 2 (2015), 107–125.
- [7] ANDERSON JR, J. D. *Fundamentals of aerodynamics*. Tata McGraw-Hill Education, 2010.
- [8] ANDRONOV, V., BAKHRAKH, S., MESHKOV, E., MOKHOV, V., NIKIFOROV, V., PEVNITSKII, A., AND TOLSHMYAKOV, A. Turbulent mixing at contact surface accelerated by shock waves. *Sov. Phys. JETP* 44, 2 (1976), 424–427.

- [9] ANTANOVSKII, L. K. A phase field model of capillarity. *Physics of fluids* 7, 4 (1995), 747–753.
- [10] ARTZI, M. B. The generalized riemann’s problem for reactive flows. *Preprint* (1989).
- [11] ASHGRIZ, N., AND POO, J. Flair: Flux line-segment model for advection and interface reconstruction. *Journal of computational physics* 93, 2 (1991), 449–468.
- [12] ASLAM, T. D. A level-set algorithm for tracking discontinuities in hyperbolic conservation laws: I. scalar equations. *Journal of Computational Physics* 167, 2 (2001), 413–438.
- [13] ASLAM, T. D. A level set algorithm for tracking discontinuities in hyperbolic conservation laws ii: systems of equations. *Journal of Scientific computing* 19, 1-3 (2003), 37–62.
- [14] AULISA, E., MANSERVISI, S., AND SCARDOVELLI, R. A mixed markers and volume-of-fluid method for the reconstruction and advection of interfaces in two-phase and free-boundary flows. *Journal of Computational Physics* 188, 2 (2003), 611–639.
- [15] BABINSKY, H., AND HARVEY, J. K. *Shock wave-boundary-layer interactions*, vol. 32. Cambridge University Press, 2011.
- [16] BALAKRISHNAN, G., AND WILLIAMS, F. Turbulent combustion regimes for hypersonic propulsion employing hydrogen-air diffusion flames. *Journal of Propulsion and Power* 10, 3 (1994), 434–436.
- [17] BALBÁS, J., TADMOR, E., AND WU, C.-C. Non-oscillatory central schemes for one-and two-dimensional mhd equations: I. *Journal of Computational Physics* 201, 1 (2004), 261–285.
- [18] BALSARA, D. S., AND SHU, C.-W. Monotonicity preserving weighted essentially non-oscillatory schemes with increasingly high order of accuracy. *Journal of Computational Physics* 160, 2 (2000), 405–452.

- [19] BALSARA, D. S., AND SPICER, D. S. *A Staggered Mesh Algorithm Using High Order Godunov Fluxes to Ensure Solenoidal Magnetic Fields in Magnetohydrodynamic Simulations*. Academic Press Professional, Inc., 1999.
- [20] BAO, W., AND JIN, S. The random projection method for hyperbolic conservation laws with stiff reaction terms. *Journal of Computational Physics* 163, 1 (2000), 216–248.
- [21] BAO, W., AND JIN, S. The random projection method for stiff detonation capturing. *SIAM Journal on Scientific Computing* 23, 3 (2001), 1000–1026.
- [22] BAO, W., AND JIN, S. The random projection method for stiff multispecies detonation capturing. *Journal of Computational Physics* 178, 1 (2002), 37–57.
- [23] BATTEN, P., CLARKE, N., LAMBERT, C., AND CAUSON, D. M. On the choice of wavespeeds for the hllc riemann solver. *SIAM Journal on Scientific Computing* 18, 6 (1997), 1553–1570.
- [24] BERGANT, A., SIMPSON, A. R., AND TIJSSELING, A. S. Water hammer with column separation: A historical review. *Journal of fluids and structures* 22, 2 (2006), 135–171.
- [25] BERKENBOSCH, A., KAASSCHIETER, E., AND KLEIN, R. Detonation capturing for stiff combustion chemistry. *Combustion Theory and Modelling* 2, 3 (1998), 313–348.
- [26] BISWAS, R., DEVINE, K. D., AND FLAHERTY, J. E. Parallel, adaptive finite element methods for conservation laws. *Applied Numerical Mathematics* 14, 1-3 (1994), 255–283.
- [27] BOLLINGER, L. E. Experimental detonation velocities and induction distances in hydrogen-air mixtures. *AIAA Journal* 2, 1 (1964), 131–133.
- [28] BONOMETTI, T., AND MAGNAUDET, J. An interface-capturing method for incompressible two-phase flows. validation and application to bubble dynamics. *International Journal of Multiphase Flow* 33, 2 (2007), 109–133.

- [29] BOOK, D. L., BORIS, J. P., AND HAIN, K. Flux-corrected transport ii: Generalizations of the method. *Journal of Computational Physics* 18, 3 (1975), 248–283.
- [30] BORGES, R., CARMONA, M., COSTA, B., AND DON, W. S. An improved weighted essentially non-oscillatory scheme for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics* 227, 6 (2008), 3191–3211.
- [31] BORIS, J. P., AND BOOK, D. Flux-corrected transport. iii. minimal-error fct algorithms. *Journal of Computational Physics* 20, 4 (1976), 397–431.
- [32] BORIS, J. P., AND BOOK, D. L. Flux-corrected transport. i. shasta, a fluid transport algorithm that works. *Journal of computational physics* 11, 1 (1973), 38–69.
- [33] BOURLIOUX, A., MAJDA, A. J., AND ROYTBURD, V. Theoretical and numerical structure for unstable one-dimensional detonations. *SIAM Journal on Applied Mathematics* 51, 2 (1991), 303–343.
- [34] BRACKBILL, J., KOTHE, D. B., AND ZEMACH, C. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of computational physics* 100, 2 (1992), 335–354.
- [35] BRACKBILL, J. U., AND BARNES, D. C. The effect of nonzero γ on the numerical solution of the magnetohydrodynamic equations. *Journal of Computational Physics* 35, 3 (1980), 426–430.
- [36] BRACKBILL, J. U., KOTHE, D. B., AND RUPPEL, H. M. Flip: a low-dissipation, particle-in-cell method for fluid flow. *Computer Physics Communications* 48, 1 (1988), 25–38.
- [37] BRENNEN, C. E. *Fundamentals of multiphase flow*. Cambridge university press, 2005.
- [38] BRIO, M., AND WU, C. C. An upwind differencing scheme for the equations of ideal magnetohydrodynamics. *Journal of computational physics* 75, 2 (1988), 400–422.

-
- [39] BURSTEIN, S. Z., AND MIRIN, A. A. Third order difference methods for hyperbolic equations. *Journal of Computational Physics* 5, 3 (1970), 547–571.
- [40] BUSSING, T., AND PAPPAS, G. An introduction to pulse detonation engines. In *32nd Aerospace Sciences Meeting and Exhibit* (1994), p. 263.
- [41] BUSSING, T., AND PAPPAS, G. Pulse detonation engine theory and concepts. *Developments in high-speed-vehicle propulsion systems(A 97-15029 02-07)*, Reston, VA, American Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc.(*Progress in Astronautics and Aeronautics. 165* (1996), 421–472.
- [42] BYKOVSKII, F. A., ZHDAN, S. A., AND VEDERNIKOV, E. F. Continuous spin detonations. *Journal of Propulsion and Power* 22, 6 (2006), 1204.
- [43] CALDER, A. C., CURTIS, B. C., DURSI, L., FRYXELL, B., MACNEICE, P., OLSON, K., RICKER, P., ROSNER, R., TIMMES, F., TUFO, H., ET AL. High performance reactive fluid flow simulations using adaptive mesh refinement on thousands of processors. In *Proceedings of the 2000 ACM/IEEE conference on Supercomputing* (2000), IEEE Computer Society, p. 56.
- [44] CHANG, S.-H. *On the application of subcell resolution to conservation laws with stiff source terms*. National Aeronautics and Space Administration, 1989.
- [45] CHANG, S.-H. On the application of eno scheme with subcell resolution to conservation laws with stiff source terms. In *Computational Fluid Dynamics Symposium on Aeropropulsion* (1991), vol. 1, pp. 215–225.
- [46] CHANG, T., CHEN, G.-Q., AND YANG, S. On the 2-d riemann problem for the compressible euler equations. i. interaction of shocks and rarefaction waves. *Discrete and Continuous Dynamical Systems* 1 (1995), 555–584.

- [47] CHANG, T., CHEN, G.-Q., AND YANG, S. On the 2-d riemann problem for the compressible euler equations ii. interaction of contact discontinuities. *Discrete and Continuous Dynamical Systems* 6, 2 (2000), 419–430.
- [48] CHAPMAN, D. L. Vi. on the rate of explosion in gases. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 47, 284 (1899), 90–104.
- [49] CHEN, G. Q. Convergence of the lax-friedrichs scheme for isentropic gas dynamics (iii). *Acta Math. Sci* 6, 1 (1986), 75–120.
- [50] CHEN, S. Stability of a mach configuration. *Communications on pure and applied mathematics* 59, 1 (2006), 1–35.
- [51] CHÉRET, R. *Detonation of condensed explosives*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [52] CHIPMAN, F. A-stable runge-kutta processes. *BIT Numerical Mathematics* 11, 4 (1971), 384–388.
- [53] CHORIN, A. J. Random choice solution of hyperbolic systems. *Journal of Computational Physics* 22, 4 (1976), 517–533.
- [54] CHOU, C.-S., AND SHU, C.-W. High order residual distribution conservative finite difference weno schemes for convection–diffusion steady state problems on non-smooth meshes. *Journal of Computational Physics* 224, 2 (2007), 992–1020.
- [55] COCCHI, J.-P., AND SAUREL, R. A riemann problem based method for the resolution of compressible multimaterial flows. *Journal of Computational Physics* 137, 2 (1997), 265–298.
- [56] COCKBURN, B., AND SHU, C.-W. Tvb runge-kutta local projection discontinuous galerkin finite element method for conservation laws. ii. general framework. *Mathematics of computation* 52, 186 (1989), 411–435.

- [57] COCKBURN, B., AND SHU, C.-W. Nonlinearly stable compact schemes for shock calculations. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 31, 3 (1994), 607–627.
- [58] COLELLA, P. Glimm’s method for gas dynamics. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 3, 1 (1982), 76–110.
- [59] COLELLA, P., MAJDA, A., AND ROYTBURD, V. Theoretical and numerical structure for reacting shock waves. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 7, 4 (1986), 1059–1080.
- [60] COLLINS, J. B., AND LEVINE, H. Diffuse interface model of diffusion-limited crystal growth. *Physical Review B* 31, 9 (1985), 6119.
- [61] COSTA, B., AND DON, W. S. Multi-domain hybrid spectral-weno methods for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics* 224, 2 (2007), 970–991.
- [62] COURANT, R., FRIEDRICHS, K., AND LEWY, H. Über die partiellen differenzengleichungen der mathematischen physik. *Mathematische annalen* 100, 1 (1928), 32–74.
- [63] COURANT, R., AND FRIEDRICHS, K. O. *Supersonic flow and shock waves*, vol. 21. Springer Science & Business Media, 1999.
- [64] CRANDALL, M., AND MAJDA, A. The method of fractional steps for conservation laws. *Numerische Mathematik* 34, 3 (1980), 285–314.
- [65] CRANDALL, M. G. The semigroup approach to first order quasilinear equations in several space variables. *Israel Journal of Mathematics* 12, 2 (1972), 108–132.
- [66] DAFERMOS, C. M. Generalized characteristics and the structure of solutions of hyperbolic conservation laws. Tech. rep., DTIC Document, 1976.
- [67] DAHLQUIST, G. G. A special stability problem for linear multistep methods. *BIT Numerical Mathematics* 3, 1 (1963), 27–43.

- [68] DAI, W., AND WOODWARD, P. R. An approximate riemann solver for ideal magnetohydrodynamics. *Journal of Computational Physics* 111, 2 (1994), 354–372.
- [69] DAMEVIN, H.-M., AND HOFFMANN, K. Development of a modified runge-kutta scheme with tvd limiters for ideal three-dimensional magnetogasdynamics. In *32nd AIAA Plasmadynamics and Lasers Conference* (2001), p. 2739.
- [70] DAVIS, S. F. An interface tracking method for hyperbolic systems of conservation laws. *Applied Numerical Mathematics* 10, 6 (1992), 447–472.
- [71] DE SOUSA, F., MANGIAVACCHI, N., NONATO, L., CASTELO, A., TOMÉ, M., FERREIRA, V., CUMINATO, J., AND MCKEE, S. A front-tracking/front-capturing method for the simulation of 3d multi-fluid flows with free surfaces. *Journal of Computational Physics* 198, 2 (2004), 469–499.
- [72] DEITERDING, R., AND BADER, G. High-resolution simulation of detonations with detailed chemistry. In *Analysis and Numerics for Conservation Laws*. Springer, 2005, pp. 69–91.
- [73] DENG, X., AND MAEKAWA, H. Compact high-order accurate nonlinear schemes. *Journal of Computational Physics* 130, 1 (1997), 77–91.
- [74] DING, X. X., CHEN, G. Q., AND LUO, P. Z. Convergence of the lax-friedrichs scheme for isentropic gas-dynamics. 1. *Acta Mathematica Scientia* 5, 4 (1985), 415–432.
- [75] DIPERNA, R. J. Convergence of the viscosity method for isentropic gas dynamics. *Communications in mathematical physics* 91, 1 (1983), 1–30.
- [76] DIRAC, P. The lorentz transformation and absolute time. *Physica* 19, 1–12 (1953), 888–896.

- [77] DONG, L., AND WANG, B. Trajectory-tracking scheme in lagrangian form for solving linear advection problems: preliminary tests. *Monthly Weather Review* 140, 2 (2012), 650–663.
- [78] DÖRING, W. On detonation processes in gases. *Ann. Phys* 43, 421-436 (1943), 9.
- [79] DREMIN, A. N., SAVROV, S., TROFIMOV, V. S., AND SHVEDOV, K. Detonation waves in condensed media. Tech. rep., DTIC Document, 1972.
- [80] DU, Q., LIU, C., AND WANG, X. Retrieving topological information for phase field models. *SIAM Journal on Applied Mathematics* 65, 6 (2005), 1913–1932.
- [81] EBERHARDT, S., AND IMLAY, S. Diagonal implicit scheme for computing flows with finite rate chemistry. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer* 6, 2 (1992), 208–216.
- [82] ECKETT, C. A. *Numerical and analytical studies of the dynamics of gaseous detonations*. PhD thesis, Citeseer, 2000.
- [83] EDWARDS, D., WALKER, J., AND NETTLETON, M. On the propagation of detonation waves along wedges. *Archivum Combustionis* 4 (1984), 197–209.
- [84] EDWARDS, J. R. A low-diffusion flux-splitting scheme for navier-stokes calculations. *Computers & Fluids* 26, 6 (1997), 635–659.
- [85] ELLING, V., AND LIU, T.-P. Supersonic flow onto a solid wedge. *Communications on Pure and Applied Mathematics* 61, 10 (2008), 1347–1448.
- [86] ELLIOTT, C. M., AND SONGMU, Z. On the cahn-hilliard equation. *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 96, 4 (1986), 339–357.
- [87] ENGQUIST, B., AND SJÖGREEN, B. *Robust difference approximations of stiff inviscid detonation waves*. Department of Mathematics, University of California, Los Angeles, 1991.

- [88] ENRIGHT, D., FEDKIW, R., FERZIGER, J., AND MITCHELL, I. A hybrid particle level set method for improved interface capturing. *Journal of Computational physics* 183, 1 (2002), 83–116.
- [89] ENRIGHT, D., LOSASSO, F., AND FEDKIW, R. A fast and accurate semi-lagrangian particle level set method. *Computers & structures* 83, 6 (2005), 479–490.
- [90] EVANS, M. W., HARLOW, F. H., AND BROMBERG, E. The particle-in-cell method for hydrodynamic calculations. Tech. rep., DTIC Document, 1957.
- [91] FAN, Y., DURLOFSKY, L. J., AND TCHELEPI, H. A. A fully-coupled flow-reactive-transport formulation based on element conservation, with application to co₂ storage simulations. *Advances in Water Resources* 42 (2012), 47–61.
- [92] FAY, J. A. Two-dimensional gaseous detonations: Velocity deficit. *The Physics of Fluids* 2, 3 (1959), 283–289.
- [93] FEDKIW, R. P., ASLAM, T., MERRIMAN, B., AND OSHER, S. A non-oscillatory eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the ghost fluid method). *Journal of computational physics* 152, 2 (1999), 457–492.
- [94] FEYNMAN, R., AND VERNON JR., F. The theory of a general quantum system interacting with a linear dissipative system. *Annals of Physics* 24 (1963), 118–173.
- [95] FICKETT, W., AND DAVIS, W. C. *Detonation: theory and experiment*. Courier Corporation, 2012.
- [96] FREIDBERG, J. P. Ideal magnetohydrodynamics.
- [97] GAITONDE, D. V. Development of a solver for 3-d non-ideal magnetogas-dynamics. *AIAA paper* 99 (1999), 3610.

-
- [98] GAO, Z. Numerical perturbation algorithm and its cfd schemes. *Advances in Mechanics* 40 (2010), 607–633.
- [99] GELFAND, I. Some problems in the theory of quasilinear equations. *Amer. Math. Soc. Transl* 29, 2 (1963), 295–381.
- [100] GEROLYMOS, G., SÉNÉCHAL, D., AND VALLET, I. Very-high-order weno schemes. *Journal of Computational Physics* 228, 23 (2009), 8481–8524.
- [101] GHOSH, D., AND BAEDER, J. D. Weighted non-linear compact schemes for the direct numerical simulation of compressible, turbulent flows. *Journal of Scientific Computing* 61, 1 (2014), 61–89.
- [102] GLAISTER, P. An approximate linearised riemann solver for the euler equations for real gases. *Journal of Computational Physics* 74, 2 (1988), 382–408.
- [103] GLASSMAN, I., YETTER, R. A., AND GLUMAC, N. G. *Combustion*. Academic press, 2014.
- [104] GLIMM, J. Solutions in the large for nonlinear hyperbolic systems of equations. *Communications on Pure and Applied Mathematics* 18, 4 (1965), 697–715.
- [105] GLIMM, J., GROVE, J. W., LI, X., AND ZHAO, N. Simple front tracking. *Contemporary Mathematics* 238, 2 (1999), 133–149.
- [106] GLIMM, J., AND LAX, P. D. Decay of solutions of systems of nonlinear hyperbolic conservation laws.
- [107] GODUNOV, S. K. A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics. *Matematicheskii Sbornik* 89, 3 (1959), 271–306.
- [108] GOMES, J., AND FAUGERAS, O. Reconciling distance functions and level sets. In *Biomedical Imaging, 2002. 5th IEEE EMBS International Summer School on* (2002), IEEE, pp. 15–pp.

- [109] GOODMAN, J., AND XIN, Z. Viscous limits for piecewise smooth solutions to systems of conservation laws. *Archive for rational mechanics and analysis* 121, 3 (1992), 235–265.
- [110] GOODMAN, J. B., AND LEVEQUE, R. J. On the accuracy of stable schemes for 2d scalar conservation laws. *Mathematics of computation* (1985), 15–21.
- [111] G.STRANG. *Linear Algebra and its Applications*, 3rd ed. Fort Worth, TX: Harcourt Brace Jovanovich, 1988.
- [112] GUIRAO, C., KNYSTAUTAS, R., AND LEE, J. *A summary of hydrogen-air detonation experiments*. Division of Systems Research, Office of Nuclear Regulatory Research, US Nuclear Regulatory Commission, 1989.
- [113] GUO, C., WANG, C., XU, S., AND ZHANG, H. Cellular pattern evolution in gaseous detonation diffraction in a 90-branched channel. *Combustion and flame* 148, 3 (2007), 89–99.
- [114] GURSKI, K. F. An hllc-type approximate riemann solver for ideal magnetohydrodynamics. *SIAM Journal on Scientific Computing* 25, 6 (2004), 2165–2187.
- [115] HADJADJ, A., PERROT, Y., AND VERMA, S. Numerical study of shock/boundary layer interaction in supersonic overexpanded nozzles. *Aerospace Science and Technology* 42 (2015), 158–168.
- [116] HAIER, E., NORSETT, S., AND WANNER, G. Solving ordinary differential equations i, nonstiff problems. *Section III 8* (1987).
- [117] HAIRER, E., AND WANNER, G. Stiff differential equations solved by radau methods. *Journal of Computational and Applied Mathematics* 111, 1 (1999), 93–111.
- [118] HAMMER, P. C., AND HOLLINGSWORTH, J. W. Trapezoidal methods of approximating solutions of differential equations. *Mathematical Tables and Other Aids to Computation* (1955), 92–96.

-
- [119] HAMMITT, F. G. *Cavitation and multiphases flow phenomena*. McGraw-Hill, 1980.
- [120] HAN, S.-H., LEE, J.-I., AND KIM, K. H. Accurate and robust pressure weight advection upstream splitting method for magnetohydrodynamics equations. *AIAA journal* 47, 4 (2009), 970.
- [121] HÄNEL, D., SCHWANE, R., AND SEIDER, G. On the accuracy of upwind schemes for the solution of the navier-stokes equations. *AIAA paper 1105* (1987), 1987.
- [122] HARLOW, F. H. Hydrodynamic problems involving large fluid distortions. *Journal of the ACM (JACM)* 4, 2 (1957), 137–142.
- [123] HARLOW, F. H., WELCH, J. E., ET AL. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Physics of fluids* 8, 12 (1965), 2182.
- [124] HARLOW F, W. J. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with a free surface. *Phys Fluids* 8, 218 (1965), 2–9.
- [125] HARTEN, A. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of computational physics* 49, 3 (1983), 357–393.
- [126] HARTEN, A. Eno schemes with subcell resolution.[essentially nonoscillatory.
- [127] HARTEN, A., ENGQUIST, B., OSHER, S., AND CHAKRAVARTHY, S. R. Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes, iii. *Journal of computational physics* 71, 2 (1987), 231–303.
- [128] HARTEN, A., LAX, P. D., AND VAN LEER, B. On upstream differencing and godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. *SIAM Review* 25, 1 (1983), 35.

- [129] HARTEN, A., LAX, P. D., AND VAN LEER, B. On upstream differencing and godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. In *Upwind and High-Resolution Schemes*. Springer, 1997, pp. 53–79.
- [130] HARTEN, A., OSHER, S., ENGQUIST, B., AND CHAKRAVARTHY, S. R. Some results on uniformly high-order accurate essentially nonoscillatory schemes. *Applied Numerical Mathematics* 2, 3-5 (1986), 347–377.
- [131] HELZEL, C., LEVEQUE, R. J., AND WARNECKE, G. A modified fractional step method for the accurate approximation of detonation waves. *SIAM Journal on Scientific Computing* 22, 4 (2000), 1489–1510.
- [132] HENRICK, A. K., ASLAM, T. D., AND POWERS, J. M. Mapped weighted essentially non-oscillatory schemes: achieving optimal order near critical points. *Journal of Computational Physics* 207, 2 (2005), 542–567.
- [133] HILDEBRAND, N., DWIVEDI, A., SHRESTHA, P., NICHOLS, J. W., JOVANOVIC, M. R., AND CANDLER, G. V. Global stability analysis of oblique shock/boundary layer interactions at mach 5.92. In *APS Division of Fluid Dynamics Meeting Abstracts* (2016).
- [134] HILL, D. J., AND PULLIN, D. I. Hybrid tuned center-difference-weno method for large eddy simulations in the presence of strong shocks. *Journal of Computational Physics* 194, 2 (2004), 435–450.
- [135] HIRT, C. W., AND NICHOLS, B. D. Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of computational physics* 39, 1 (1981), 201–225.
- [136] HONKKILA, V., AND JANHUNEN, P. Hllc solver for ideal relativistic mhd. *Journal of Computational Physics* 223, 2 (2007), 643–656.
- [137] HOPF, E. The partial differential equation $u_t + u u_x = \mu x x$. *Communications on Pure and Applied mathematics* 3, 3 (1950), 201–230.

-
- [138] HU, X., ADAMS, N., AND IACCARINO, G. On the hllc riemann solver for interface interaction in compressible multi-fluid flow. *Journal of Computational Physics* 228, 17 (2009), 6572–6589.
- [139] HU, X., KHOO, B., ADAMS, N. A., AND HUANG, F. A conservative interface method for compressible flows. *Journal of Computational Physics* 219, 2 (2006), 553–578.
- [140] HU, X. Y., AND KHOO, B. C. An interface interaction method for compressible multifluids. *Journal of Computational Physics* 198, 1 (2004), 35–64.
- [141] HU, X.-Y., ZHANG, D.-L., AND JIANG, Z.-L. Numerical simulation of gaseous detonation with detailed chemical reaction model. *Acta Aerodynamica Sinica* 21, 1 (2003), 59–66.
- [142] HUANG, F., AND WANG, Z. Convergence of viscosity solutions for isothermal gas dynamics. *SIAM journal on mathematical analysis* 34, 3 (2002), 595–610.
- [143] HUANG, J., AND WEBB, W. Diffuse interface in a critical fluid mixture. *The Journal of Chemical Physics* 50, 9 (1969), 3677–3693.
- [144] HWANG, P., FEDKIW, R., MERRIMAN, B., ASLAM, T., KARAGOZIAN, A., AND OSHER, S. Numerical resolution of pulsating detonation waves. *DCJ* 2 (2000), 1.
- [145] JACQMIN, D. Calculation of two-phase navier–stokes flows using phase-field modeling. *Journal of Computational Physics* 155, 1 (1999), 96–127.
- [146] JAMET, D., LEBAGUE, O., COUTRIS, N., AND DELHAYE, J. The second gradient method for the direct numerical simulation of liquid–vapor flows with phase change. *Journal of Computational Physics* 169, 2 (2001), 624–651.

- [147] JANHUNEN, P. A positive conservative method for magnetohydrodynamics based on hll and roe methods. *Journal of Computational Physics* 160, 2 (2000), 649–661.
- [148] JELTSCH, R., AND KLINGENSTEIN, P. Error estimators for the position of discontinuities in hyperbolic conservation laws with source terms which are solved using operator splitting. *Computing and Visualization in Science* 1, 4 (1999), 231–249.
- [149] JI, H., LIEN, F.-S., AND YEE, E. A new adaptive mesh refinement data structure with an application to detonation. *Journal of Computational Physics* 229, 23 (2010), 8981–8993.
- [150] JIANG, G.-S., AND SHU, C.-W. Efficient implementation of weighted eno schemes. *Journal of computational physics* 126, 1 (1996), 202–228.
- [151] JIANG, L., SHAN, H., AND LIU, C. Weighted compact scheme for shock capturing. *International Journal of Computational Fluid Dynamics* 15, 2 (2001), 147–155.
- [152] JOHNSEN, E., LARSSON, J., BHAGATWALA, A. V., CABOT, W. H., MOIN, P., OLSON, B. J., RAWAT, P. S., SHANKAR, S. K., SJÖGREEN, B., YEE, H., ET AL. Assessment of high-resolution methods for numerical simulations of compressible turbulence with shock waves. *Journal of Computational Physics* 229, 4 (2010), 1213–1237.
- [153] JOHNSON, C. Error estimates and adaptive time-step control for a class of one-step methods for stiff ordinary differential equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 25, 4 (1988), 908–926.
- [154] JOUGUET, E. On the propagation of chemical reactions in gases. *J. de mathematiques Pures et Appliquees* 1, 347-425 (1905), 2.
- [155] KIM, D., AND KWON, J. H. A high-order accurate hybrid scheme using a central flux scheme and a weno scheme for compressible flowfield analysis. *Journal of Computational Physics* 210, 2 (2005), 554–583.

-
- [156] KIM, J., AND LOWENGRUB, J. Phase field modeling and simulation of three-phase flows. *Interfaces and free boundaries* 7, 4 (2005), 435–466.
- [157] KIM, K. H., KIM, C., AND RHO, O.-H. Methods for the accurate computations of hypersonic flows: I. ausmpw+ scheme. *Journal of Computational Physics* 174, 1 (2001), 38–80.
- [158] KIM, K. H., LEE, J. H., AND RHO, O. H. An improvement of ausm schemes by introducing the pressure-based weight functions. *Computers & fluids* 27, 3 (1998), 311–346.
- [159] KIM, M. S., AND LEE, W. I. A new vof-based numerical scheme for the simulation of fluid flow with free surface. part i: New free surface-tracking algorithm and its verification. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 42, 7 (2003), 765–790.
- [160] KNIO, O. M., NAJM, H. N., AND WYCKOFF, P. S. A semi-implicit numerical scheme for reacting flow: Ii. stiff, operator-split formulation. *Journal of Computational Physics* 154, 2 (1999), 428–467.
- [161] KOLEV, N. I. *Multiphase flow dynamics: Fundamentals*. Springer, 2005.
- [162] KOTOV, D., YEE, H., WANG, W., AND SHU, C. On spurious numerics in solving reactive equations. *Proceedings of the ASTRONUM-2012, The Big Island, Hawaii* (2012), 24–28.
- [163] KRIVODONOVA, L., XIN, J., REMACLE, J.-F., CHEVAUGEON, N., AND FLAHERTY, J. E. Shock detection and limiting with discontinuous galerkin methods for hyperbolic conservation laws. *Applied Numerical Mathematics* 48, 3-4 (2004), 323–338.
- [164] LAFAURIE, B., NARDONE, C., SCARDOVELLI, R., ZALESKI, S., AND ZANETTI, G. Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with surfer. *Journal of Computational Physics* 113, 1 (1994), 134–147.
- [165] LAX, P., AND WENDROFF, B. Systems of conservation laws. *Communications on Pure and Applied mathematics* 13, 2 (1960), 217–237.

- [166] LAX, P. D. Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation. *Communications on pure and applied mathematics* 7, 1 (1954), 159–193.
- [167] LAX, P. D. Hyperbolic systems of conservation laws ii. *Communications on pure and applied mathematics* 10, 4 (1957), 537–566.
- [168] LAX, P. D. *Decay of solutions of systems of nonlinear hyperbolic conservation laws*, vol. 101. American Mathematical Soc., 1970.
- [169] LAX, P. D., AND LIU, X.-D. Solution of two-dimensional riemann problems of gas dynamics by positive schemes. *SIAM Journal on Scientific Computing* 19, 2 (1998), 319–340.
- [170] LECKNER, B. Fluidized bed combustion: mixing and pollutant limitation. *Progress in Energy and Combustion Science* 24, 1 (1998), 31–61.
- [171] LEE, J. H. *The detonation phenomenon*, vol. 2. Cambridge University Press Cambridge, 2008.
- [172] LELE, S. K. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *Journal of computational physics* 103, 1 (1992), 16–42.
- [173] LEMOS, C. A simple numerical technique for turbulent flows with free surfaces. *International journal for numerical methods in fluids* 15, 2 (1992), 127–146.
- [174] LEMOS, C. M. Higher-order schemes for free surface flows with arbitrary configurations. *International journal for numerical methods in fluids* 23, 6 (1996), 545–566.
- [175] LEVEQUE, R. J. *Numerical methods for conservation laws*. Springer Science & Business Media, 1992.
- [176] LEVEQUE, R. J., AND YEE, H. C. A study of numerical methods for hyperbolic conservation laws with stiff source terms. *Journal of computational physics* 86, 1 (1990), 187–210.

-
- [177] LEVY, D., PUPPO, G., AND RUSSO, G. Compact central weno schemes for multidimensional conservation laws. *SIAM Journal on Scientific Computing* 22, 2 (2000), 656–672.
- [178] LI, G., AND QIU, J. Hybrid weighted essentially non-oscillatory schemes with different indicators. *Journal of Computational Physics* 229, 21 (2010), 8105–8129.
- [179] LI, Z., JABERI, F. A., AND SHIH, T. I. A hybrid lagrangian-eulerian particle-level set method for numerical simulations of two-fluid turbulent flows. *International journal for numerical methods in fluids* 56, 12 (2008), 2271–2300.
- [180] LIONS, P.-L., PERTHAME, B., AND SOUGANIDIS, P. E. Existence and stability of entropy solutions for the hyperbolic systems of isentropic gas dynamics in eulerian and lagrangian coordinates. *Communications on pure and applied mathematics* 49, 6 (1996), 599–638.
- [181] LIONS, P.-L., PERTHAME, B., AND TADMOR, E. Kinetic formulation of the isentropic gas dynamics andp-systems. *Communications in mathematical physics* 163, 2 (1994), 415–431.
- [182] LIOU, M.-S. Progress towards an improved cfd method: Ausm+. *AIAA paper 1701* (1995), 155.
- [183] LIOU, M.-S. A sequel to ausm: Ausm+. *Journal of computational Physics* 129, 2 (1996), 364–382.
- [184] LIOU, M.-S. *Ten Years in the Making: AUSM-family*. National Aeronautics and Space Administration, Glenn Research Center, 2001.
- [185] LIOU, M.-S. A sequel to ausm, part ii: Ausm+-up for all speeds. *Journal of Computational Physics* 214, 1 (2006), 137–170.
- [186] LIOU, M.-S., AND STEFFEN, C. J. A new flux splitting scheme. *Journal of Computational physics* 107, 1 (1993), 23–39.

- [187] LIU, L., AND BECERRA, M. An efficient semi-lagrangian algorithm for simulation of corona discharges: the position-state separation method. *IEEE Transactions on Plasma Science* 44, 11 (2016), 2822–2831.
- [188] LIU, T., KHOO, B., AND WANG, C. The ghost fluid method for compressible gas–water simulation. *Journal of Computational Physics* 204, 1 (2005), 193–221.
- [189] LIU, T., KHOO, B., AND YEO, K. Ghost fluid method for strong shock impacting on material interface. *Journal of Computational Physics* 190, 2 (2003), 651–681.
- [190] LIU, T.-P., AND SMOLLER, J. A. On the vacuum state for the isentropic gas dynamics equations. *Advances in Applied Mathematics* 1, 4 (1980), 345–359.
- [191] LIU, X.-D., OSHER, S., AND CHAN, T. Weighted essentially non-oscillatory schemes. *Journal of computational physics* 115, 1 (1994), 200–212.
- [192] LIU, Y., AND JIANG, Z. Reconsideration on the role of the specific heat ratio in arrhenius law applications. *Acta Mechanica Sinica* 24, 3 (2008), 261–266.
- [193] LOMBARD, C., BARDINA, J., VENKATAPATHY, E., AND OLIGER, J. Multi-dimensional formulation of cscm-an upwind flux difference eigenvector split method for the compressible navier-stokes equations. In *6th Computational Fluid Dynamics Conference* (1983), pp. 649–664.
- [194] LV, Y., AND IHME, M. Development of discontinuous galerkin method for detonation and supersonic combustion. *AIAA Paper 688* (2013), 2013.
- [195] MACCORMACK, R. An upwind conservation form method for ideal magnetohydrodynamics equations, aiaa, 1999.
- [196] MACCORMACK, R. The effect of viscosity in hypervelocity impact cratering. *AIAA Paper No. 69-354* (1969).

-
- [197] MACCORMACK, R. W. Non-equilibrium ionized flow simulations within strong electro-magnetic fields. In *48th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition: Aerospace Sciences Meetings* (2010), pp. 2010–0225.
- [198] MARTÍN, M. P., TAYLOR, E. M., WU, M., AND WEIRS, V. G. A bandwidth-optimized weno scheme for the effective direct numerical simulation of compressible turbulence. *Journal of Computational Physics* 220, 1 (2006), 270–289.
- [199] MCKEE, S., TOMÉ, M., FERREIRA, V., CUMINATO, J., CASTELO, A., SOUSA, F., AND MANGIAVACCHI, N. The mac method. *Computers & Fluids* 37, 8 (2008), 907–930.
- [200] McLACHLAN, R. I., AND QUISPEL, G. R. W. Splitting methods. *Acta Numerica* 11 (2002), 341–434.
- [201] McRAE, G. J., GOODIN, W. R., AND SEINFELD, J. H. Numerical solution of the atmospheric diffusion equation for chemically reacting flows. *Journal of Computational Physics* 45, 1 (1982), 1–42.
- [202] MERRITT, E. C., MOSER, A. L., HSU, S. C., LOVERICH, J., AND GILMORE, M. Experimental characterization of the stagnation layer between two obliquely merging supersonic plasma jets. *Physical review letters* 111, 8 (2013), 085003.
- [203] MESHKOV, E. Instability of the interface of two gases accelerated by a shock wave. *Fluid Dynamics* 4, 5 (1969), 101–104.
- [204] MIKEŠ, J., STEPANOV, S., AND JUKL, M. The pre-maxwell equations. In *Geometric Methods in Physics*. Springer, 2013, pp. 377–381.
- [205] MIYOSHI, T., AND KUSANO, K. A multi-state hll approximate riemann solver for ideal magnetohydrodynamics. *Journal of Computational Physics* 208, 1 (2005), 315–344.

- [206] MORESI, L., DUFOUR, F., AND MÜHLHAUS, H.-B. A lagrangian integration point finite element method for large deformation modeling of viscoelastic geomaterials. *Journal of Computational Physics* 184, 2 (2003), 476–497.
- [207] MORETTI, G. Computation of flows with shocks. *Annual Review of Fluid Mechanics* 19, 1 (1987), 313–337.
- [208] MOUREAU, V., FIORINA, B., AND PITSCH, H. A level set formulation for premixed combustion les considering the turbulent flame structure. *Combustion and Flame* 156, 4 (2009), 801–812.
- [209] NAJM, H. N., WYCKOFF, P. S., AND KNIO, O. M. A semi-implicit numerical scheme for reacting flow: I. stiff chemistry. *Journal of Computational Physics* 143, 2 (1998), 381–402.
- [210] NGUYEN, D., GIBOU, F., AND FEDKIW, R. A fully conservative ghost fluid method and stiff detonation waves. In *12th Int. Detonation Symposium, San Diego, CA* (2002).
- [211] NICHOLS, B., AND HIRT, C. Improved free surface boundary conditions for numerical incompressible-flow calculations. *Journal of Computational Physics* 8, 3 (1971), 434–448.
- [212] NICHOLS, J. W., LARSSON, J., BERNARDINI, M., AND PIROZZOLI, S. Stability and modal analysis of shock/boundary layer interactions. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics* (2016), 1–18.
- [213] NOURGALIEV, R. R., DINH, T.-N., AND THEOFANOUS, T. G. Adaptive characteristics-based matching for compressible multifluid dynamics. *Journal of Computational Physics* 213, 2 (2006), 500–529.
- [214] OLEINIK, O. A. Discontinuous solutions of non-linear differential equations. *Uspekhi Matematicheskikh Nauk* 12, 3 (1957), 3–73.

- [215] OLEINIK, O. A. On the uniqueness of the generalized solution of the cauchy problem for a non-linear system of equations occurring in mechanics. *Uspekhi Matematicheskikh Nauk* 12, 6 (1957), 169–176.
- [216] OLEINIK, O. A. Uniqueness and stability of the generalized solution of the cauchy problem for a quasi-linear equation. *Uspekhi Matematicheskikh Nauk* 14, 2 (1959), 165–170.
- [217] OLSSON, E., AND KREISS, G. A conservative level set method for two phase flow. *Journal of computational physics* 210, 1 (2005), 225–246.
- [218] ORAN, E. S., WEBER, J. W., STEFANIW, E. I., LEFEBVRE, M. H., AND ANDERSON, J. D. A numerical study of a two-dimensional h₂-o₂ detonation using a detailed chemical reaction model. *Combustion and Flame* 113, 1 (1998), 147–163.
- [219] ORSZAG, S. A., AND TANG, C. M. Small-scale structure of two-dimensional magnetohydrodynamic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics* 90, 1 (1979), 129–143.
- [220] OSHER, S. Shock modelling in transonic and supersonic flow.
- [221] OSHER, S., AND FEDKIW, R. *Level set methods and dynamic implicit surfaces*, vol. 153. Springer Science & Business Media, 2006.
- [222] OSHER, S., AND SETHIAN, J. A. Fronts propagating with curvature-dependent speed: algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of computational physics* 79, 1 (1988), 12–49.
- [223] OSHER, S., AND SOLOMON, F. Upwind difference schemes for hyperbolic systems of conservation laws. *Mathematics of computation* 38, 158 (1982), 339–374.
- [224] PANG, Y., CAI, S., AND ZHAO, Y. Global solutions to the two-dimensional riemann problem for a system of conservation laws. *Journal of Mathematical Physics* 57, 6 (2016), 061501.

- [225] P.D.LAX. Shock waves and entropy, in contributions to nonlinear functional analysis (e. a. zarantonello, ed.). *Academic Press, New York* (1971), 603–634.
- [226] P.D.LAX, B. W. Hyperbolic systems of conservation laws ii. *Comm. Pure Appl. Math.* 13 (1960), 537–566.
- [227] PENG, J., AND SHEN, Y. Improvement of weighted compact scheme with multi-step strategy for supersonic compressible flow. *Computers & Fluids* 115 (2015), 243–255.
- [228] PILLIOD, J. E., AND PUCKETT, E. G. Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces. *Journal of Computational Physics* 199, 2 (2004), 465–502.
- [229] PIROZZOLI, S. Conservative hybrid compact-weno schemes for shock-turbulence interaction. *Journal of Computational Physics* 178, 1 (2002), 81–117.
- [230] PIROZZOLI, S. Numerical methods for high-speed flows. *Annual review of fluid mechanics* 43 (2011), 163–194.
- [231] POINSOT, T., ECHEKKI, T., AND MUNGAL, M. A study of the laminar flame tip and implications for premixed turbulent combustion. *Combustion science and technology* 81, 1-3 (1992), 45–73.
- [232] POPINET, S., AND ZALESKI, S. A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 30, 6 (1999), 775–793.
- [233] POWELL, K. G., ROE, P. L., LINDE, T. J., GOMBOSI, T. I., AND DE ZEEUW, D. L. A solution-adaptive upwind scheme for ideal magnetohydrodynamics. *Journal of Computational Physics* 154, 2 (1999), 284–309.
- [234] POWERS, J. M., AND PAOLUCCI, S. Accurate spatial resolution estimates for reactive supersonic flow with detailed chemistry. *AIAA journal* 43, 5 (2005), 1088–1099.

-
- [235] QIU, J., AND SHU, C.-W. A comparison of troubled-cell indicators for runge–kutta discontinuous galerkin methods using weighted essentially nonoscillatory limiters. *SIAM Journal on Scientific Computing* 27, 3 (2005), 995–1013.
- [236] REN, Y.-X., ZHANG, H., ET AL. A characteristic-wise hybrid compact-weno scheme for solving hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics* 192, 2 (2003), 365–386.
- [237] RICHARDSON, L. F. *Weather prediction by numerical process*. Cambridge University Press, 2007.
- [238] RIDER, W. J., AND KOTHE, D. B. Reconstructing volume tracking. *Journal of computational physics* 141, 2 (1998), 112–152.
- [239] RIEMANN, B. *Über die Fortpflanzung ebener Luftwellen von endlicher Schwingungsweite*. Verlag der Dieterichschen Buchhandlung, 1860.
- [240] ROE, P. L. Approximate riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes. *Journal of computational physics* 43, 2 (1981), 357–372.
- [241] ROE, P. L., AND BALSARA, D. S. Notes on the eigensystem of magnetohydrodynamics. *SIAM Journal on Applied Mathematics* 56, 1 (1996), 57–67.
- [242] ROY, G., FROLOV, S., BORISOV, A., AND NETZER, D. Pulse detonation propulsion: challenges, current status, and future perspective. *Progress in Energy and Combustion Science* 30, 6 (2004), 545–672.
- [243] RUBIN, E. L., AND BURSTEIN, S. Z. Difference methods for the inviscid and viscous equations of a compressible gas. *Journal of Computational Physics* 2, 2 (1967), 178–196.
- [244] RUPERT, V. Shock-interface interaction: current research on the richtmyer-meshkov problem. In *Shock Waves*. Springer, 1992, pp. 83–94.

- [245] RUSANOV, V. On difference schemes of third order accuracy for nonlinear hyperbolic systems. *Journal of Computational Physics* 5, 3 (1970), 507–516.
- [246] SCARDOVELLI, R., AND ZALESKI, S. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annual review of fluid mechanics* 31, 1 (1999), 567–603.
- [247] SCHECTER, S., AND SHEARER, M. Undercompressive shocks for non-strictly hyperbolic conservation laws. *Journal of Dynamics and Differential Equations* 3, 2 (1991), 199–271.
- [248] SCHULTZ, E., AND SHEPHERD, J. Validation of detailed reaction mechanisms for detonation simulation.
- [249] SCHULZ-RINNE, C. W. Classification of the riemann problem for two-dimensional gas dynamics. *SIAM journal on mathematical analysis* 24, 1 (1993), 76–88.
- [250] SETHIAN, J. A. *Level set methods and fast marching methods: evolving interfaces in computational geometry, fluid mechanics, computer vision, and materials science*, vol. 3. Cambridge university press, 1999.
- [251] SHAMPINE, L. F. *Numerical solution of ordinary differential equations*, vol. 4. CRC Press, 1994.
- [252] SHANG, J. Recent research in magneto-aerodynamics. *Progress in Aerospace Sciences* 37, 1 (2001), 1–20.
- [253] SHEN, Y., LIU, L., AND YANG, Y. Multistep weighted essentially non-oscillatory scheme. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 75, 4 (2014), 231–249.
- [254] SHEN, Y., YANG, G., AND GAO, Z. High-resolution finite compact difference schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics* 216, 1 (2006), 114–137.

-
- [255] SHEN, Y., AND ZHA, G. Application of low diffusion e-cusp scheme with high order weno scheme for chemical reacting flows. In *40th Fluid Dynamics Conference and Exhibit* (2010), p. 4995.
- [256] SHEN, Y., AND ZHA, G. Generalized finite compact difference scheme for shock/complex flowfield interaction. *Journal of Computational Physics* 230, 12 (2011), 4419–4436.
- [257] SHEN, Y., AND ZHA, G. Improvement of weighted essentially non-oscillatory schemes near discontinuities. *Computers & Fluids* 96 (2014), 1–9.
- [258] SHEN, Y., ZHA, G., AND CHEN, X. High order conservative differencing for viscous terms and the application to vortex-induced vibration flows. *Journal of Computational Physics* 228, 22 (2009), 8283–8300.
- [259] SHEN, Y., ZHA, G., AND HUERTA, M. A. E-cusp scheme for the equations of ideal magnetohydrodynamics with high order weno scheme. *Journal of Computational Physics* 231, 19 (2012), 6233–6247.
- [260] SHEN, Y.-Q., WANG, R.-Q., AND LIAO, H.-Z. A fifth-order accurate weighted enn difference scheme and its applications. *Journal of Computational Mathematics* (2001), 531–538.
- [261] SHENG, W. Two-dimensional riemann problem for scalar conservation laws. *Journal of Differential Equations* 183, 1 (2002), 239–261.
- [262] SHEPHERD, J. Detonation in gases. *Proceedings of the Combustion Institute* 32, 1 (2009), 83–98.
- [263] SHIN, S., AND JURIC, D. Modeling three-dimensional multiphase flow using a level contour reconstruction method for front tracking without connectivity. *Journal of Computational Physics* 180, 2 (2002), 427–470.
- [264] SHIPILOVA, O., HAARIO, H., AND SMOLIANSKI, A. Particle transport method for convection problems with reaction and diffusion. *International journal for numerical methods in fluids* 54, 10 (2007), 1215–1238.

- [265] SHU, C.-W. Total-variation-diminishing time discretizations. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 9, 6 (1988), 1073–1084.
- [266] SHU, C.-W., AND OSHER, S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. *Journal of Computational Physics* 77, 2 (1988), 439–471.
- [267] SHU, C.-W., AND OSHER, S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes, ii. *Journal of Computational Physics* 83, 1 (1989), 32–78.
- [268] SHYUE, K.-M. An efficient shock-capturing algorithm for compressible multicomponent problems. *Journal of Computational Physics* 142, 1 (1998), 208–242.
- [269] SMOLIANSKI, A., SHIPILOVA, O., AND HAARIO, H. A fast high-resolution algorithm for linear convection problems: particle transport method. *International journal for numerical methods in engineering* 70, 6 (2007), 655–684.
- [270] SMOLLER, J. *Shock waves and reaction—diffusion equations*, vol. 258. Springer Science & Business Media, 2012.
- [271] SMOOKE, M., PURI, I., AND SESHADRI, K. A comparison between numerical calculations and experimental measurements of the structure of a counterflow diffusion flame burning diluted methane in diluted air. In *Symposium (International) on Combustion* (1988), vol. 21, Elsevier, pp. 1783–1792.
- [272] SOLOUKHIN, R. Multiheaded structure of gaseous detonation. *Combustion and Flame* 10, 1 (1966), 51–58.
- [273] SOO KIM, M., SUN PARK, J., AND LEE, W. I. A new vof-based numerical scheme for the simulation of fluid flow with free surface. part ii: application to the cavity filling and sloshing problems. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 42, 7 (2003), 791–812.

-
- [274] STEGER, J. L., AND WARMING, R. Flux vector splitting of the inviscid gasdynamic equations with application to finite-difference methods. *Journal of computational physics* 40, 2 (1981), 263–293.
- [275] STRANG, G. On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 5, 3 (1968), 506–517.
- [276] STULL, D. R., AND PROPHET, H. Janaf thermochemical tables. Tech. rep., National Standard Reference Data System, 1971.
- [277] SUSSMAN, M. A second order coupled level set and volume-of-fluid method for computing growth and collapse of vapor bubbles. *Journal of Computational Physics* 187, 1 (2003), 110–136.
- [278] SUSSMAN, M., AND PUCKETT, E. G. A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3d and axisymmetric incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics* 162, 2 (2000), 301–337.
- [279] SUSSMAN, M., SMEREKA, P., AND OSHER, S. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *Journal of Computational physics* 114, 1 (1994), 146–159.
- [280] TAN, D. C., AND ZHANG, T. Two-dimensional riemann problem for a hyperbolic system of nonlinear conservation laws: I. four-j cases. *Journal of differential equations* 111, 2 (1994), 203–254.
- [281] TARTAR, L. Compensated compactness and applications to partial differential equations. In *Nonlinear analysis and mechanics: Heriot-Watt symposium* (1979), vol. 4, pp. 136–212.
- [282] TARTAR, L. The compensated compactness method applied to systems of conservation laws. In *Systems of nonlinear partial differential equations*. Springer, 1983, pp. 263–285.
- [283] TOMÉ, M., CUMINATO, J., MANGIAVACCHI, N., MCKEE, S., ET AL. Gensmac3d: a numerical method for solving unsteady three-dimensional

- free surface flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 37, 7 (2001), 747–796.
- [284] TOME, M. F., AND MCKEE, S. Gensmac: A computational marker and cell method for free surface flows in general domains. *Journal of Computational Physics* 110, 1 (1994), 171–186.
- [285] TORO, E. F., SPRUCE, M., AND SPEARES, W. Restoration of the contact surface in the hll-riemann solver. *Shock waves* 4, 1 (1994), 25–34.
- [286] TORRES, D., AND BRACKBILL, J. The point-set method: front-tracking without connectivity. *Journal of Computational Physics* 165, 2 (2000), 620–644.
- [287] TOSATTO, L., AND VIGEVANO, L. Numerical solution of under-resolved detonations. *Journal of Computational Physics* 227, 4 (2008), 2317–2343.
- [288] TÓTH, G. The $\nabla \cdot \mathbf{b} = 0$ constraint in shock-capturing magnetohydrodynamics codes. *Journal of Computational Physics* 161, 2 (2000), 605–652.
- [289] TROTSYUK, A. Numerical simulation of the structure of two-dimensional gaseous detonation of an h₂-o₂-ar mixture. *Combustion, Explosion and Shock Waves* 35, 5 (1999), 549–558.
- [290] TRYGGVASON, G., BUNNER, B., ESMAEELI, A., JURIC, D., AL-RAWAHI, N., TAUBER, W., HAN, J., NAS, S., AND JAN, Y.-J. A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *Journal of Computational Physics* 169, 2 (2001), 708–759.
- [291] TUMUKLU, O., LEVIN, D. A., AND AUSTIN, J. M. Shock-shock interactions for a double wedge configuration in different gases. In *53rd AIAA Aerospace Sciences Meeting* (2015), p. 1520.
- [292] UNVERDI, S. O., AND TRYGGVASON, G. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of computational physics* 100, 1 (1992), 25–37.

-
- [293] VAN LEER, B. Towards the ultimate conservative difference scheme i. the quest of monotonicity. 163–168.
- [294] VAN LEER, B. Towards the ultimate conservative difference scheme. ii. monotonicity and conservation combined in a second-order scheme. *Journal of computational physics* 14, 4 (1974), 361–370.
- [295] VAN LEER, B. Towards the ultimate conservative difference scheme iii. upstream-centered finite-difference schemes for ideal compressible flow. *Journal of Computational Physics* 23, 3 (1977), 263–275.
- [296] VAN LEER, B. Towards the ultimate conservative difference scheme. iv. a new approach to numerical convection. *Journal of computational physics* 23, 3 (1977), 276–299.
- [297] VAN LEER, B. Towards the ultimate conservative difference scheme. v. a second-order sequel to godunov’s method. *Journal of computational Physics* 32, 1 (1979), 101–136.
- [298] VAN LEER, B. Flux-vector splitting for the euler equations. In *IN: International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics, 8th, Aachen, West Germany, June 28-July 2, 1982, Proceedings (A84-35301 16-34)*. Berlin, Springer-Verlag, 1982, p. 507-512. (1982), pp. 507–512.
- [299] VON NEUMAN, J. Theory of detonation waves. Tech. rep., DTIC Document, 1942.
- [300] WADA, Y., AND LIOU, M. An accurate and robust splitting scheme for shock and contact discontinuities, aiaa, 1994.
- [301] WANG, C., LIU, T., AND KHOO, B. A real ghost fluid method for the simulation of multimediuim compressible flow. *SIAM Journal on Scientific Computing* 28, 1 (2006), 278–302.
- [302] WANG, C., XU, S., AND GUO, C. Gaseous detonation propagation in a bifurcated tube. *Journal of Fluid Mechanics* 599 (2008), 81–110.

- [303] WANG, C., ZHANG, D.-L., AND JIANG, Z.-L. Numerical investigation of detonation sweeping on an interface of inert gas and its decoupling. *Explosion and Shock Waves* 26, 6 (2006), 556.
- [304] WANG, W., SHU, C.-W., YEE, H., KOTOV, D. V., AND SJÖGREEN, B. High order finite difference methods with subcell resolution for stiff multispecies discontinuity capturing. *Communications in Computational Physics* 17, 02 (2015), 317–336.
- [305] WANG, W., SHU, C.-W., YEE, H., AND SJÖGREEN, B. High order finite difference methods with subcell resolution for advection equations with stiff source terms. *Journal of Computational Physics* 231, 1 (2012), 190–214.
- [306] WANG, X., AND DU, Q. Modelling and simulations of multi-component lipid membranes and open membranes via diffuse interface approaches. *Journal of mathematical biology* 56, 3 (2008), 347–371.
- [307] WANG, Z. J., AND CHEN, R. Optimized weighted essentially nonoscillatory schemes for linear waves with discontinuity. *Journal of Computational Physics* 174, 1 (2001), 381–404.
- [308] WANNER, G., AND HAIRER, E. Solving ordinary differential equations ii. *Stiff and Differential-Algebraic Problems* (1991).
- [309] WELCH, J. E., HARLOW, F. H., SHANNON, J. P., AND DALY, B. J. The mac method-a computing technique for solving viscous, incompressible, transient fluid-flow problems involving free surfaces. Tech. rep., Los Alamos Scientific Lab., Univ. of California, N. Mex., 1965.
- [310] WOODWARD, P., AND COLELLA, P. The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks. *Journal of computational physics* 54, 1 (1984), 115–173.
- [311] XIANG, G., WANG, C., TENG, H., AND JIANG, Z. Investigations of three-dimensional shock/shock interactions over symmetrical intersecting wedges. *AIAA Journal* 54, 1 (2016), 1472–1481.

- [312] XU, Z., AND SHU, C.-W. Anti-diffusive flux corrections for high order finite difference weno schemes. *Journal of Computational Physics* 205, 2 (2005), 458–485.
- [313] YANG, G., YAO, Y., FANG, J., GAN, T., AND LU, L. Large-eddy simulation of shock-wave/turbulent boundary layer interaction and its control using sparkjet. In *International Journal of Modern Physics: Conference Series* (2016), vol. 42, World Scientific, p. 1660186.
- [314] YEE, H., KOTOV, D. V., WANG, W., AND SHU, C.-W. Spurious behavior of shock-capturing methods by the fractional step approach: Problems containing stiff source terms and discontinuities. *Journal of Computational Physics* 241 (2013), 266–291.
- [315] YEE, H., SANDHAM, N., AND DJOMEHRI, M. Low-dissipative high-order shock-capturing methods using characteristic-based filters. *Journal of Computational Physics* 150, 1 (1999), 199–238.
- [316] YEE, H., AND SJÖGREEN, B. Development of low dissipative high order filter schemes for multiscale navier–stokes/mhd systems. *Journal of Computational Physics* 225, 1 (2007), 910–934.
- [317] YEE, H., AND SJÖGREEN, B. High order filter methods for wide range of compressible flow speeds. In *Spectral and High Order Methods for Partial Differential Equations*. Springer, 2011, pp. 327–337.
- [318] YOON, H., PARK, I., LEE, Y., AND JEONG, J. An unstructured smac algorithm for thermal non-equilibrium two-phase flows. *International Communications in Heat and Mass Transfer* 36, 1 (2009), 16–24.
- [319] YOUNG, F. R. *Cavitation*. World Scientific, 1999.
- [320] YOUNGS, D. L. Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion. *Numerical methods for fluid dynamics* 24, 2 (1982), 273–285.

- [321] YU, C., GAO, Z., AND SHEU, T. W. Development of a symplectic and phase error reducing perturbation finite-difference advection scheme. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals* 70, 2 (2016), 136–151.
- [322] YU, S.-H. Zero-dissipation limit of solutions with shocks for systems of hyperbolic conservation laws. *Archive for rational mechanics and analysis* 146, 4 (1999), 275–370.
- [323] YUE, P., ZHOU, C., AND FENG, J. J. Sharp-interface limit of the cahn–hilliard model for moving contact lines. *Journal of Fluid Mechanics* 645 (2010), 279–294.
- [324] ZALESAK, S. T. Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids. *Journal of computational physics* 31, 3 (1979), 335–362.
- [325] ZELDOVICH, J. To the theory of detonation propagation in gas systems. *Journal of experimental and theoretical physics* 10, 5 (1940), 542–568.
- [326] ZHA, G. Comparative study of upwind scheme performance for entropy condition and discontinuities, aiaa, 1999. Tech. rep., Paper 99-CP-3348, June 28-July 1.
- [327] ZHA, G., SHEN, Y., AND WANG, B. Calculation of transonic flows using weno method with a low diffusion e-cusp upwind scheme. In *46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit* (2008), p. 745.
- [328] ZHA, G.-C. Numerical tests of upwind scheme performance for entropy condition. *AIAA journal* 37, 8 (1999), 1005–1007.
- [329] ZHA, G.-C. A low diffusion e-cusp upwind scheme for transonic flows. In *34th AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit* (2004), p. 2707.
- [330] ZHA, G.-C. Low diffusion efficient upwind scheme. *AIAA journal* 43, 5 (2005), 1137–1140.

- [331] ZHA, G.-C., AND BILGEN, E. Numerical solutions of euler equations by using a new flux vector splitting scheme. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 17, 2 (1993), 115–144.
- [332] ZHA, G.-C., AND HU, Z. Calculation of transonic internal flows using an efficient high-resolution upwind scheme. *AIAA journal* 42, 2 (2004), 205–214.
- [333] ZHA, G.-C., SHEN, Y., AND WANG, B. An improved low diffusion e-cusp upwind scheme. *Computers & Fluids* 48, 1 (2011), 214–220.
- [334] ZHANG, B., LIU, H., CHEN, F., AND WANG, J. H. The equilibrium state method for hyperbolic conservation laws with stiff reaction terms. *Journal of Computational Physics* 263 (2014), 151–176.
- [335] ZHANG, S., JIANG, S., AND SHU, C.-W. Development of nonlinear weighted compact schemes with increasingly higher order accuracy. *Journal of Computational Physics* 227, 15 (2008), 7294–7321.
- [336] ZHANG, T., AND ZHENG, Y. X. Conjecture on the structure of solutions of the riemann problem for two-dimensional gas dynamics systems. *SIAM Journal on Mathematical Analysis* 21, 3 (1990), 593–630.
- [337] ZHELTOVODOV, A. Shock waves/turbulent boundary-layer interactions-fundamental studies and applications. In *Fluid Dynamics Conference* (1996), p. 1977.
- [338] ZHI, G. Advances in perturbation finite difference (pfd) method [j]. *Advances in Mechanics* 2 (2000), 003.
- [339] ZHOU, Q., YAO, Z., HE, F., AND SHEN, M. A new family of high-order compact upwind difference schemes with good spectral resolution. *Journal of Computational Physics* 227, 2 (2007), 1306–1339.
- [340] ZHU, H., AND QIU, J. Adaptive runge-kutta discontinuous galerkin methods using different indicators: one-dimensional case. *Journal of Computational Physics* 228, 18 (2009), 6957–6976.

- [341] 傅德薰, 马延文, ET AL. 计算流体力学. 高等教育出版社, 2002.
- [342] 刘小民. 一维非严格双曲守恒律方程的 *Riemann* 问题. PhD thesis, 中国科学院研究生院 (武汉物理与数学研究所), 2012.
- [343] 姜宗林, 滕宏辉, AND 刘云峰. 气相爆轰物理的若干研究进展. 力学进展 42, 2 (2012), 129–140.
- [344] 应隆安, AND 滕振寰. 双曲型守恒律方程及其差分方法, 1991.
- [345] 张德良, ET AL. 计算流体力学教程. 高等教育出版社, 2010.
- [346] 张旭东, 范宝春, 潘振华, AND 归明月. 旋转爆轰自持机理的数值研究. 弹道学报 23, 1 (2011), 1–4.
- [347] 张薇, 刘云峰, 姜宗林, ET AL. 气相爆轰波胞格尺度与点火延迟时间关系研究.
- [348] 杨瑞芳. 非齐次双曲型守恒律组的粘性解与弱解的研究. PhD thesis, 南京航空航天大学, 2007.
- [349] 潘振华, 范宝春, AND 归明月. T 型管内流动气体中爆轰绕射过程的数值模拟. 爆炸与冲击 34, 6 (2014), 709–715.
- [350] 王东红. 多介质流体界面追踪方法研究及误差分析. PhD thesis, 南京航空航天大学, 2014.
- [351] 王儒智. Banach 空间中非线性脉冲 volterra 积分方程的 $l_{\infty}(\text{loc}) \sim p$ 解. Master's thesis, 山东师范大学, 2005.
- [352] 王昌建, AND 徐胜利. 直管内胞格爆轰的基元反应数值研究. 爆炸与冲击 25, 5 (2005), 405–416.
- [353] 申义庆, 高智, AND 杨顶辉. 一阶双曲方程的摄动有限差分格式. 计算物理 22, 6 (2005), 650–656.
- [354] 童秉纲, 孔祥言, 邓国华, ET AL. 气体动力学. 高等教育出版社, 1990.

-
- [355] 肖伟. 气体动力学中压差方程双对称结构 *Riemann* 问题. PhD thesis, 上海大学, 2012.
- [356] 胡宗民, 牟乾辉, 张德良, AND 姜宗林. 爆轰波在弯管内传播过程数值分析. 计算物理 21, 5 (2004), 408–414.
- [357] 赖耕. 二维可压流体 *Euler* 方程的几类流动结构. PhD thesis, 上海大学, 2010.
- [358] 赵宁, 余彦, AND 唐维军. Rm 不稳定性数值模拟方法. 计算数学 (2001).
- [359] 高智. 对流扩散方程的高精度差分算法. 北京计算流体力学讨论会文集 (第六辑) 1223 (1994).
- [360] 高智, AND 柏威. 对流扩散方程的摄动有限体积 (pfv) 方法及讨论. 力学学报 36, 1 (2004), 88–92.