

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 10 月

Typeset by L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 2<sub><</sub> at October 18, 2017

With package C<sub>A</sub>Sthesis v0.2 of CT<sub>E</sub>X.ORG

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

---

**A dissertation submitted to**  
**University of Chinese Academy of Sciences**  
**in partial fulfillment of the requirement**  
**for the degree of**  
**Doctor of Philosophy**  
**in Fluid Mechanics**  
**By**  
**Liu Li**  
**Supervisor: Professor Shen Yiqing**

**Institute of Mechanics**  
**Chinese Academy of Sciences**

**October 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，加权基本无振荡（WENO）格式由于既能无振荡的捕捉激波，在光滑区又具有一致高阶的精度而得到越来越多的应用。但是，已有一些 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。针对 WENO 格式在过渡点附近区域所表现出的不足，本文提出多步加权思想及多步加权基本无振荡（Multistep WENO）格式，有效提高了 WENO 在激波附近的计算精度。此外，大量研究表明，对可压缩湍流的大涡模拟、直接数值模拟研究，WENO 格式仍然存在耗散过大等不足之处，因此需要发展高精度低耗散低色散的激波捕捉格式，如构造激波捕捉格式与线性格式的杂交格式等，对于这类格式，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，得出基于模板光滑因子（整体/局部关系）的 SZ 识别方法由于不带人为的判别参数而最为有效。为高性能杂交格式提供了一个理想的构造思路。进一步基于 SZ 识别方法，发展了理想磁流体（MHD）方程求解的有限紧致格式求解算法。
- (2) 界面是性质不同于激波的另一类间断问题，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。DIP 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，反应和流动存在尺度差距，由于激波捕捉格式本身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。本文提出将反应 Euler 方程分裂为流动 Euler 方程、组分对流方程和组分反应方程，进一步将 DIP 方法应用在组分对流方程求解中，能有效避免化学反应流动模拟中的刚性问题，如非物理的爆轰波传播速度等。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，新的求解方法能很好地保持总组分的守恒性，避免爆轰波波前和波后组分的振荡，在精度方面也比传统的求解方法表现的更好。

- (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，并将其应用于爆轰波的数值模拟中，验证了所发展格式的高精度及稳定性等性质。

**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. Various challenges come from those discontinuities, such as, the shock waves 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 get high resolution in simulating different types of discontinuities.

Shock waves is one of the main characteristics in the compressible flows. Although the shock-capturing methods have been developed in nearly half a century, it is still an active topic. Recent years, the weighted essentially non-oscillatory (WENO) schemes have been widely used, as they can capture the shock waves without oscillation and get high-order accuracy in the smooth regions. From its birth, the WENO schemes have been improved, such as WENO-JS, WENO-Z, WENO-M schemes. These schemes mainly focus on improving the optimal order at critical points, but they cannot obtain the optimal accuracy at the transition points, which connect a smooth region and a discontinuity. In this paper a new multistep method is proposed and a new fifth-order WENO scheme is constructed to improve the accuracy at transition points. Besides, for some problems, such as compressible turbulence flows, higher order accuracy is needed in the smooth region to resolve the high frequency waves. Hybrid scheme is a good idea to obtain both the advantages of shock-capturing and low dissipation in the smooth regions. The key of the hybrid method is how to detect the shock waves accurately. This paper compares various shock detectors, the numerical results show that the SZ detector based on the property of smoothness estimators (relation between the global stencil and local stencil) is the most accurate one. Furthermore, one kind of hybrid scheme using 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, it is needed to solve the interface with more than three phases or with the diffusive interface model. The diffusive interface is encountered when the thickness of the interface region can not be ignored such as in the cases with diffusion, phase changing or chemical reaction. However, the existed interface methods such as the level-set

method and volume of fluid (VOF) method have problems when they are 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 point is limited in 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. The difference in the scales between the reaction and convection may cause stiff problems, such as a wrong detonation speed or unphysical wave structure. 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 detailed chemistry to improve the conservation of components, the stability near the discontinuities and the accuracy.

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

**Keywords:** shock-capturing method, multistep WENO scheme, dual information preseving method, numerical perturbation method, stiff reacting flow

# 目录

摘要 .....	i
<b>Abstract</b> .....	iii
目录 .....	v
<b>第一章 引言</b> .....	1
1.1 本文研究的范围及其方程系统 .....	1
1.1.1 Euler 方程 .....	2
1.1.2 理想磁流体方程 .....	3
1.1.3 化学反应 Euler 方程 .....	4
1.2 可压缩流中间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 .....	8
1.2.2 黎曼问题和 Euler 方程近似解 .....	9
1.3 计算流体力学和数值方法发展 .....	10
1.3.1 计算流体力学简介 .....	10
1.3.2 数值方法的发展 .....	11
1.4 间断问题数值研究现状和不足 .....	16
1.4.1 激波捕捉格式和激波分辨率 .....	16
1.4.2 物质界面和界面追踪方法 .....	16
1.4.3 气相爆轰波 .....	19
1.5 本文所开展研究内容 .....	27
<b>第二章 多步加权基本无振荡 (Multistep WENO) 格式</b> .....	29
2.1 本章涉及的数值方法 .....	30
2.1.1 Lax-Friedrichs (LF) 通量分裂方法和空间半离散 .....	30
2.1.2 加权基本无振荡/WENO 格式 [100, 108, 223] .....	30
2.1.3 Runge-Kutta 时间方法 .....	32
2.2 过渡点精度分析 [112] .....	33
2.3 WENO 格式的多步加权方法 .....	35

2.4 数值算例 ······	37
2.4.1 线性对流算例 ······	37
2.4.2 非线性对流算例 ······	40
2.4.3 一维激波管算例 ······	40
2.4.4 二维对流传播方程 ······	47
2.4.5 二维变系数的线性对流方程算例 ······	47
2.4.6 二维激波/涡相互作用算例 ······	48
2.4.7 激波/剪切层相互作用算例 ······	49
2.5 小结 ······	52
<b>第三章 间断识别方法比较研究 ······</b>	<b>55</b>
3.1 有限紧致格式 (Finite compact scheme) ······	55
3.2 间断识别方法 ······	57
3.2.1 SZ 识别方法 [119] ······	57
3.2.2 平均总变差 (Average total variation/ATV) 识别方法 ······	57
3.2.3 基于 minmod 函数的 TVB 识别方法 [235] ······	58
3.2.4 XS 识别方法 [236] ······	59
3.2.5 Biswas, Devine 和 Flaherty 动量限制 (moment limiter) 方法 [237] (BDF) ······	59
3.2.6 KXRCF 间断识别方法 [238] ······	59
3.3 数值算例 ······	60
3.3.1 线性对流算例 ······	60
3.3.2 一维激波管算例 ······	61
3.3.3 二维算例 ······	62
3.4 小结 ······	64
<b>第四章 有限紧致格式在理想磁流体中的应用 ······</b>	<b>67</b>
4.1 数值方法 ······	68
4.1.1 E-CUSP 近似黎曼求解器 [259] ······	68
4.1.2 限制输运 (Constrained Transport/CT) 方法 [264] ······	70
4.2 数值算例 ······	71
4.2.1 二维旋转偏振 Alfvn 波 [267] ······	71
4.2.2 Orzag-Tang MHD 湍流问题 ······	71

4.3 小结 .....	73
<b>第五章 双信息保存 (DIP) 方法 .....</b>	<b>75</b>
5.1 界面类型和界面方法 .....	75
5.1.1 传统界面 .....	75
5.1.2 多相界面和耗散界面 .....	77
5.2 双信息保存方法 .....	77
5.2.1 单元点 .....	78
5.2.2 粒子信息点 (粒子点) .....	82
5.2.3 边界处理 .....	83
5.2.4 DIP 方法一维伪代码 .....	85
5.2.5 二维 DIP 方法 .....	86
5.3 数值算例 .....	90
5.3.1 一维数值算例 .....	90
5.3.2 二维数值算例 .....	93
5.4 小结 .....	98
<b>第六章 刚性常微分方程和数值摄动 (NP) 方法 .....</b>	<b>101</b>
6.1 刚性常微分 (ODE) 方程 .....	101
6.2 数值摄动 (NP) 方法 .....	102
6.3 NP 格式的稳定性分析 .....	104
6.4 不同格式的数值比较 .....	106
6.5 小结 .....	107
<b>第七章 双信息保存方法在刚性化学反应流动中的应用 .....</b>	<b>111</b>
7.1 空间刚性问题形成过程的简单分析 .....	111
7.2 求解反应 Euler 方程的分裂方法 .....	112
7.3 DIP 方法在反应 Euler 方程求解中的应用 .....	114
7.4 NP 方法在反应源项 ODE 求解中的应用 .....	115
7.4.1 固定比热比单步总包反应模型 .....	115
7.4.2 固定比热比多步反应模型 .....	115
7.5 数值算例 .....	116
7.5.1 线性对流方程算例 .....	117

7.5.2	单步总包反应模型算例 .....	117
7.5.3	固定比热比多组分模型算例 .....	128
7.6	小结 .....	135
<b>第八章</b>	<b>双信息保存方法在基元反应模型爆轰中的应用 .....</b>	<b>137</b>
8.1	基元反应模型中的热力学参数 .....	137
8.2	温度求解方法 .....	138
8.3	数值算例 .....	139
8.3.1	数值结果与分析 .....	140
8.4	小结 .....	150
<b>第九章</b>	<b>结论和展望 .....</b>	<b>151</b>
<b>Appendix A</b>	<b>二维 DIP 方法伪代码 .....</b>	<b>153</b>
<b>Appendix B</b>	<b>化学反应不同组分热力学拟合参数 .....</b>	<b>157</b>
<b>发表文章目录 .....</b>	<b>187</b>	
<b>简历 .....</b>	<b>189</b>	
<b>致谢 .....</b>	<b>191</b>	

# 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，对于几乎所有连续介质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 [1–3]。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 [4, 5]，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 [6–9]、实验研究 [10–12] 和数值模拟 [13–15] 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 [16]。事实上界面和接触间断是同一类型的间断问题 [17]，因此接触间断也被称为接触界面 [18, 19]。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，是其中一个关键问题。多相流在高速可压缩流动中同样有广泛应用 [20]，如空化 [21–23]、化学反应流动 [24] 和热核反应 [25] 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 [26–28]。爆轰波 [29–31] 的数值研究是一大前沿问题，在诸如发动机 [32, 33]、高能炸药爆炸 [30, 34, 35] 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，下面简单介绍相应的控制方程系统。

### 1.1.1 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。三维守恒型 Euler 方程如下:

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

其中

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

其中  $\rho$  为密度,  $u$  为 x 方向速度,  $v$  为 y 方向速度,  $w$  为 z 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

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

其中  $\gamma$  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 [36]。
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下。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。本文对理想磁流体的数值求解方法作了一些初步的探讨，并将 Euler 方程的数值方法推广于理想 MHD 方程求解中，验证方法的适用性及精度。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

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

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

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

状态方程为

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

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恰系统，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 [37]。

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 [38]，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 [39]，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 [39–41]。

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 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

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

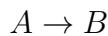
其中  $ns$  为多组分流体中的组分数,  $z_i$  和  $\omega_i$  分别为  $i$  组分质量分数和生成率。由于总的质量分数为 1, 则第  $ns$  组分为

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

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  $\epsilon$  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  $\mu$  为整数， $\chi_i$  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

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

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

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

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，基元反应模型中混合物的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 [42]。

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

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

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， $p_{\text{atm}}$  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

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

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，数值求解已经成为研究各类方程的最主要工具之一。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不同的方向。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 方程遵循双曲守恒律，关于非线性双曲守恒律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 [43] 给出关于 Burgers 方程的严格数学理论研究，被认为是双曲律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 [44–48] 等。如，由于弱解的定义不能保证问题解的唯一性，Lax [45] 和 Oleinik [46] 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，也推动了守恒律方程研究的发展。

理论上，对于非线性双曲守恒律方程，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。针对于如下一般形式的双曲守恒律方程

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

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。弱解可以定义为 [49]:

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.  $u \in L^1_{loc}(\Omega)$ ,
2.  $f(u) \in L^1_{loc}(\Omega)$ ,
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  $u$  在广义上满足双曲守恒律方程 (1.19)，或称  $u$  为方程 (1.19) 的一个弱解。其中  $R$  为实数空间， $L^1_{loc}$  为强可测一阶可积空间 [50]， $C$  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，当前仅对单守恒律方程有完善的理论研究 [44, 48, 51]，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 [52] 和补偿列紧理论 [53, 54]。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”解的存在性，其中“小初值”指的是初始值总变差  $TV(u_0)$  充分小，并和 Lax [55] 证明了  $2 \times 2$  非线性方程组在严格双曲及初始扰动充分小的假设下弱解的存在性。然而该方法依然存在一定的局限性 [56]。补偿列理论在 80 年代由 Tartar 提出 [57, 58]，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 [59]，1985 年 Ding 等人 [60, 61]，1994 年和 1996 年 Lions 等 [62, 63] 的一系列工作解决了等熵流动方程

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

解存在性问题。其中， $p = p_0 \rho^\gamma$ 。但是，即便是在无黏、无传热流体中，流体穿过激波也不是等熵过程。目前补偿列紧理论只能适用于严格双曲的  $2 \times 2$  方程组

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

高维问题的理论研究，目前是数学上的热点和难点，尚缺乏充分的理论结果 [64–66]。

### 1.2.2 黎曼问题和 Euler 方程近似解

尽管欧拉方程解的存在性在数学上仍缺乏足够的证明，但是欧拉方程的近似解在很多数学、物理和工程领域都特别重要。最早可以追溯到 1858 年，伯恩哈德·黎曼 [1] 在

研究激波管问题时，通过设定初值为任意间断值的阶跃函数：

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

构造了 Euler 方程在该类特殊初值条件下的理论解。根据初始间断不同，黎曼构造出了四类解，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。该类初值问题（Cauchy 问题）被称为黎曼问题。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 [67]，并且开创了微分方程广义解概念及相平面分析方法之先河，具有极大的超前性。1957 年 Lax [45, 68, 69] 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。

高维的黎曼问题，如二维黎曼问题，由于复杂性，直到 80 年代，才有学者开始进行研究。1985 年，张同和郑玉玺分析了最简二维模型黎曼问题，成为二维黎曼问题的一个实质性突破。1990 年他们在文献 [70] 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 [71]，Chang [72, 73] 等，Lax 和 Liu [74] 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，尚没有一类情况得到完善的证明 [75]。

黎曼问题的重要意义并不仅在于它存在理论解，更重要的是它是构造更一般初值问题近似解的基础，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律方程理论的完善，以及人类计算能力的极大提高，通过数值方法求解双曲律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一门庞大的学科—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 [76] 作为 CFD 开始的标志。但是实际上正如我们在上一节所介绍的，早在此之前，相关理论工作已经开始，包括这之后的大量此类工作，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 [77] 提出有限差分方法求解偏微分方程时收敛的必要条件—Courant-Friedrichs-Lowy(CFL) 条件等。

计算流体力学出现后，相关的研究重点有了很大偏移，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表数问题的数值方法，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 [78] 首先采用数值方法求解非线性偏微分方程，文中他证明，要保持方程的解是单调的，那么线性对流方程的离散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在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，可以得到新的分段分布，以此推进方程的发展。Godunov 方法整体具有一阶精度，处理间断时也能得到稳定的计算结果。

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

### 1.3.2.1 空间离散方法

尽管 Godunov 定理将稳定的线性格式精度限定在一阶，但是，在 60 和 70 年代，学者们仍然试图构造了一系列更高阶的线性格式。P.D.Lax 和 B.Wendroff [79] 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 [80–83] 主导了对流方程研究领域超过了 10 年之久。

直到 70 年代，才有学者意识到想要构造高阶稳定格式，就必须通过非线性方式来避开 Godunov 定理的限定。这些工作包括：Boris 和 Book 提出的通量修正输运方法（Flux-Corrected Transport/FCT）方法和 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 [84–87]，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 [88–91]。MUSCL 类格式在 80 年代继续发展并成为当时最为流行的格式。虽然 FCT 方法和 MUSCL 格式构造方法并不相同，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，在空间离散方法接下来的发展中一直保存了这一特点。

同一时期，Harten 受到 Roe 关于迎风格式工作 [92] 的影响和 Glimm 和 Lax 关于一维标量守恒方程解的总变差是不增这一研究结果启发 [93]，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 [94, 95]，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 方法迅速得到广泛应用。

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，导致极值点精度过低。在不久之后，Goodman 和 LeVeque [95] 认为 TVD 性质在高维离散中过于严格，导致高维 TVD 对流格式精度不会高于一阶。Harten 因此重新审视了无振荡插值方面的工作，并和 Osher 等人合作提出了基本无振荡（Essentially Non-Oscillatory/ENO）格式 [96, 97]。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，然后存在过多的光滑区模板的浪费。1994 年 Liu 等人 [98] 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 [99] 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重构的基本框架。

2000 年后，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 [100] 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 格式 [101, 102] 以及中心型 WENO 格式等 [103, 104]。

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，耗散仍然可能过大难以捕捉小尺度的高频波 [105, 106]。另外，与线性格式相比，WENO 格式计算量仍然较大，降低了整体的计算效率。

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 [107] 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 [108–110] 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 [105]。值得一提的是，2015 年 Peng 和 Shen [111] 在 Shen 等人 [112, 113] 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 [114, 115]，混合紧致-WENO 格式 [116, 117] 和混合谱方法-WENO 格式 [118] 等。由于间断识别方法在杂交格式中至关重要，发展间断识别方法也是杂交格式研究的一个热门领域。2006 年 Shen 和 Zha [119] 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，并用于有限紧致格式的构造。

### 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为了解决非线性方程线性化近似的问题。在早期，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。它的主要作用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。近似黎曼求解器的发展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 (FDS) 基于对精确黎曼求解器的模拟，该类方法又称为 Godunov 类方法，如常用的基于 Jacobian 矩阵线化的 Roe 求解器 [120]、基于简单波分解的 Osher 求解器 [121]、基于两波假设的 HLL 求解器 [122] 以及可以模拟接触间断的基于三波假设的 HLLC 求解器 [18] 和需要迭代的双激波近似黎曼求解器 [123] 等。

流通矢量分裂方法 (FVS) 基于无碰撞 Boltzmann 方程，因此该类方法也称为 Boltzmann 类方法 [92]，流通矢量分裂方法将相邻单元间的分布函数进行平均，因此较通量差分分裂有较大的误差，但是由于它们形式简单、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 [44]，Steger-Warming (SW) 分裂 [124] 和 Van-Leer 分裂 [125] 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对流速度相关的对流项和与声速相关的压力项，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 FDS 的精准性，自 Liou 在 1993 年 [126] 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 [127, 128]、激波计算稳定的 AUSMDV 格式 [129]，以及结合了它们优点的 AUSMPW [130] 和 AUSMPW+ [131] 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，而总能却是守恒的 [132]，据此 Zha 提出了在对流项使用总能的 E-CUSP 格式 [133–135]，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 [136]。

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 [137] 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 节我们简单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 方程角度介绍了流体力学数值方法的发展过程，但是这些介绍较少涉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 WENO 格式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 [112] 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 格式只有三阶精度，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。该文章在两个邻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 [138]，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 [100]，但是多步加权重构的思想仍然有重要的意义。

本文基于 [112] 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状态间的分界面。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 [139]，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 [140]。

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 [139, 141, 142] 和标记（Marker）[143] 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 [144, 145]。Particle-in-Cell（PIC）方法 [146, 147] 和 Marker-and-Cell（MAC）方法 [148–151] 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 [149]，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 [141]，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 [152–154] 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 [155–157] 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 [158]，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 [159]。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 [160, 161]。然而这种结合既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）[162,163]、晶体生长[164]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）[165]。

对于耗散界面，学者主要采用 Cahn-Hilliard 方程 [166,167] 进行模拟。模拟耗散界面的方法主要有如下几种 [168]，锋面追踪方法 [141] 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 [169,170] 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）[171]、相场模型（phase-field）[165,172] 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（信息）点（Cell-Point）和粒子（信息）点（Particle-Point），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. 信息点既是虚拟粒子，又同时携带有位置信息和对流信息  $z$ 。由于信息点是虚拟的，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，而是通过信息点上的对流信息  $z$  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化学反应热用以推动激波的运动，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) [173, 174] 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 [175], Doring [176] 和 Von Neumann [177] 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分布，在前导激波过后压力突越到  $p_N$ （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。

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 [30, 179]。对于活化能较低的爆轰，脉动通

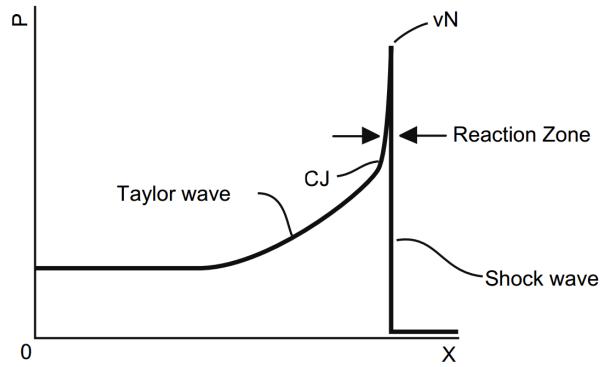


图 1.1 典型爆轰波压力曲线 [178]

Figure 1.1 A typical pressure distribution of detonation waves

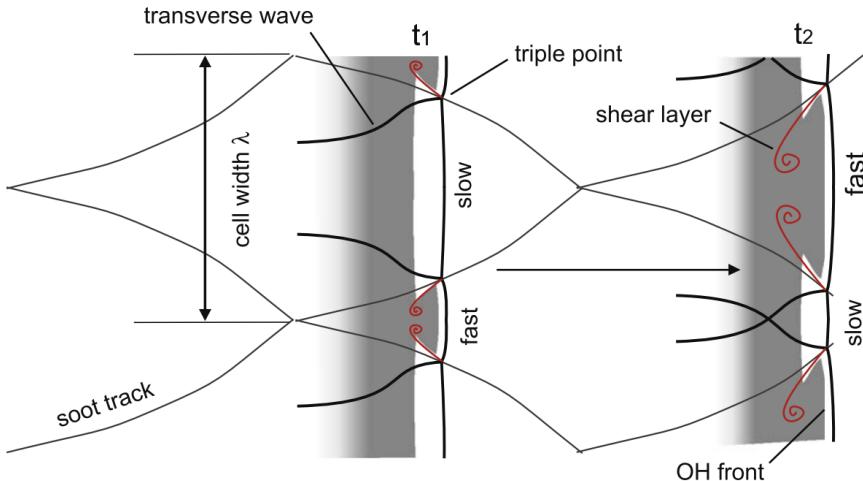


图 1.2 二维胞格结构示意图 [178]

Figure 1.3 The structure of 2D cellars

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 1.3 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，数值模拟已成为研究爆轰波的重要手段，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 [180, 181]、旋转爆轰 [182, 183]、熄火区 [184] 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，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刚性问题。当化学反应速率很快时，会导致源项存在刚性，需要更小的时间步长或是更稳定的时间方法进行求解。除此之外，刚性问题对空间网格也有限制，当网格不够精细时，可能导致非物理的计算结果的产生。另外，在采用基元反应模型的爆轰波模拟中，某些反应速率较快的组分更难以准确的计算。

#### 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 [185, 186]，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) [187] 或者全隐式的方式 [188] 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 [189]，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 [190–192]。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 [193]。

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 年代就已经较为成熟 [194, 195]，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简单介绍，这里不再赘述。

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 [196] 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稳定性 [185]，尽管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。

除上述两类常见方法外，也有一些显式格式在计算刚性 ODE 方程时同样具有一定的稳定性，如目前较为常用的线化梯形公式 (linearised Trapezoidal method/LT) [197, 198]。然而线化梯形公式仅具有二阶精度，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，在刚性更强的计算中，仍可能存在数值振荡，甚至得到发散的结果。

在本文中的第六章中，基于数值摄动的思想 [199–201]，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，对刚性问题有较好的稳定性，非常适合用来求解刚性 ODE 方程（组）。

#### 1.4.3.3 刚性化学反应流动问题

上面我们介绍了源项刚性带来的时间求解问题，该问题可以通过算子分裂结合有效的 ODE 求解方法来避免。但是如果问题中的源项刚性进一步加大，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。这一问题最早在出现在 1986 年 Colella 的研究 [202] 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 [197, 198, 203–206]。图 1.4 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的原因是由于极快的反应速度造成空间上的反应区域即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

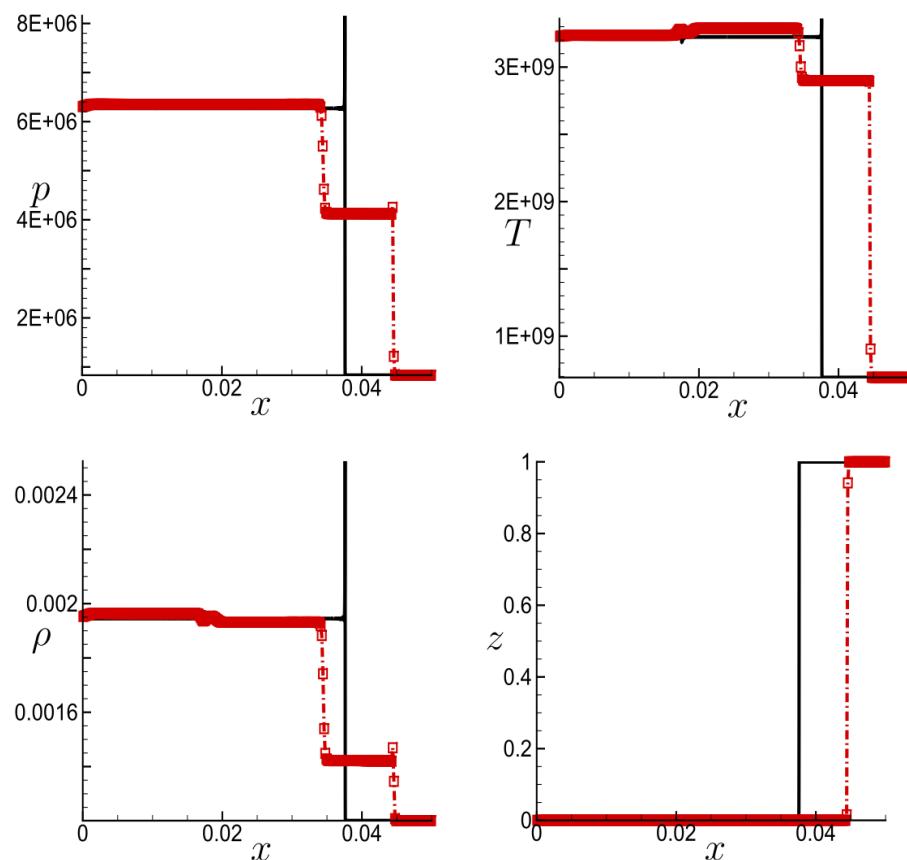


图 1.4 一个典型的爆轰波虚假传播计算结果 [198]

Figure 1.4 A typical spurious numerical result of the detonation wave

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，最理想的求解网格已经达到 $10^{-7}m$  量级 [207]，刚性化学反应流的完全求解可能需要更精细的网格。通常情况下，只能采用网格尺寸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（Under-resolved）[203]。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。该状态随着计算累积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。

文 [198] 对近 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 [203–205]，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) [197] 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是，对于复杂的化学反应，往往没法预先知道平衡态。Chang 基于 Harten 的 ENO 亚格子重构的思想 [208]，发展了对流步的有限体积 ENO 方法 [206]，Wang 等人 [198, 209] 提出了结合了反应步亚格子重构思想的高阶有限差分格式。然而，Yee 等人 2013 年指出 [210]，亚格子重构方法和他们自己提出的非线性限制器方法 [211]，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，但是随着网格的变化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 [212, 213]。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 [214]。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 [215–218]，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 [218]。2007 年 Shipilova 等人 [219] 尝试用一种 LE 方法 (PTM 方法) 求解对流-扩散-反应方程，数值结果显示 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。

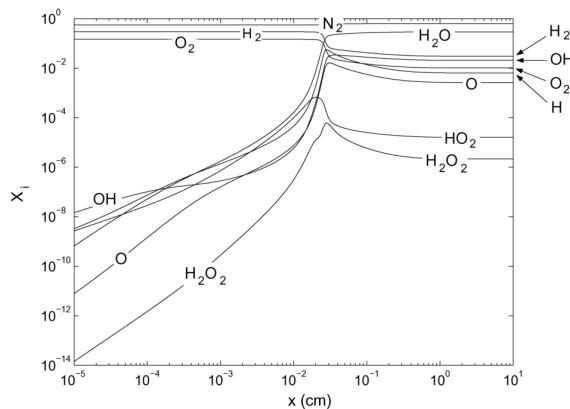


图 1.5  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 7\text{Ar}$  反应组分摩尔比变化和激波前沿距离间关系 [207]

Figure 1.5 Species mole fraction vs distance

在论文中第七章中，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生。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

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。在这种情况下，刚性反应流动问题并不常见，但是其中仍存在空间分辨率不足等问题。实际上，不同组分的反应率相差很大，图 1.5 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  $10^{-4}\text{cm}$  左右，某些曲线如  $\text{OH}$  就开始变化；对于绝大多数组分都在距离诱导激波  $10^{-4}\text{cm}$  和  $10^{-2}\text{cm}$  之间出现变化；到了  $x \approx 10^{-2}\text{cm}$  后所有组分都会剧烈变化。图 1.6 是通过特征分析给出的化学反应各组分长度尺度 (length scale) 和激波前沿距离之间的关系，从中也可以看出，不同组分长度尺度之间存在很大的差异。

对于爆轰的这种长度尺度问题，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区域采用不同密度的网格，似乎非常适合爆轰波的计算 [220, 221]，但是目前该类技术在爆轰计算仍有很多困难，因此还有待进一步的发展。在固定网格和有限的计算资源下，想要达到完全求解每一组分几乎是不可能的，由于网格分辨率不足，其中长度尺度较小的组分更容易导致过度耗散和振荡。爆轰波和激波不同，耗散和振荡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。

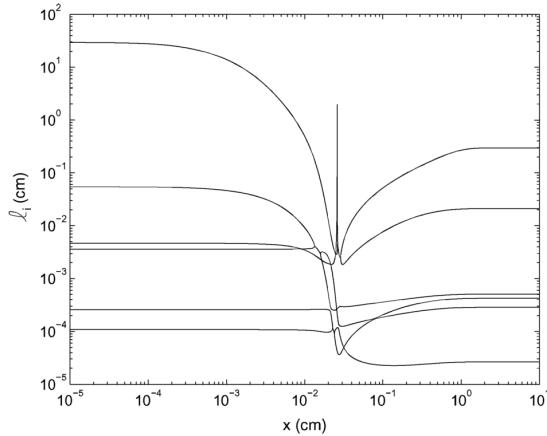


图 1.6  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 7\text{Ar}$  反应不同组分的长度尺度和激波前沿距离间关系 [207]

Figure 1.6 Length scales vs distance

对此，Powers [207] 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数波长应该和定常结构中的最佳长度尺度在同一量级。在任何情况下，尤其是在非定常问题中，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长度尺度。

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 方法推广到基于基元反应模型的爆轰波模拟中，即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

从研究内容上本文可以分成两部分，第一部分包括二、三、四章主要研究激波问题相关的方法，其中：

- 1) 在第二章中，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) 在第三章中，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，认为基于模板光滑因子（整体/局部关系）的 SZ 识别方法无人为参数，方便使用，且有较好的表现，是本文最推荐的识别方法。
- 3) 在第四章，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。

第二部分包括第五、六、七、八章，主要研究界面方法及耗散界面问题。结合第一部分的激波方法，该部分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：

- 4) 由于传统界面方法存在难以处理耗散界面等问题，在第五章中，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。
- 5) 在第六章中，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。
- 6) 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，在第七章，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。
- 7) 在应用了基元反应模型的化学反应求解中，由于某些组分长度尺度很小，经常遇到组分守恒性不好、组分振荡等问题。本文将第七章中构造的新的反应 Euler 方程求解方法应用在采用基元反应模型的爆轰求解中，新方法可以低耗散、稳定的求解组分对流过程，能较好的避免组分的非物理数值振荡，保持组分的守恒性，使得爆轰波的计算具有较高的分辨率。



## 第二章 多步加权基本无振荡 (Multistep WENO) 格式

加权基本无振荡格式 (WENO) 自 1994 年由 Liu 等人 [98] 提出及 Jiang 和 Shu [222] 改进以来，在近 20 年里已得到十分广泛的应用。WENO 格式基本思想是将 ENO 格式 [97] 的最光滑子模板用所有子模板的凸组合重构代替。在 WENO 格式构造中，子模板权重函数的计算对格式的精度和无振荡特性的保持都十分重要。

Jiang 和 Shu [222] 分析了 Liu 等人 [98] 引入的光滑因子，认为采用该光滑因子构造的权重函数只能让  $r$  阶 ENO 格式收敛到一个  $r+1$  阶 WENO 格式，他们在该文中，构造了一个经典的五阶 WENO 格式，并给出了构造光滑因子和权重函数的一般框架。2005 年 Henrick 等人 [100] 指出，Jiang 和 Shu 提出的光滑度量因子不能提高 WENO 格式在一阶导数为零的极值点精度，他们在该文章中构造了一个映射函数来得到极值点的最优精度。2008 年，Borges 等人 [223] 提出采用整体的五点模板来构造光滑因子取代 Jiang 和 Shu 经典的光滑因子。另一方面，学者们构造了一系列高于五阶的 WENO 格式 [101, 102, 224]。如 Martin 等人 [104] 提出的  $2r$  阶精度的对称型 WENO 格式，可以达到更低耗散的效果。

上面提到的 WENO 格式都是通过  $r$  阶精度的 ENO 格式来设计光滑区域到达  $2r-1$  或  $2r$  阶精度的 WENO 格式，它们的目的都是提高光滑区的精度，尤其是极值点 ( $f'_i = 0$ ) 的精度。但是，对于含有间断的问题，上述的方法在连接光滑区和间断区的过渡点，并不能达到理想精度。例如，Shen 和 Zha [112] 分析了各种五阶 WENO 格式，发现这些格式在过渡点精度只有三阶。这一缺点会影响五阶格式的整体表现，如在模拟激波诱导的分离流时或在模拟激波/湍流相互作用时。

由于解在过渡区仍然是光滑的，理论上，该点的通量可以达到四阶。换言之，可以通过四个点的光滑模板来构造一个四阶通量。在 [112] 工作中，Shen 和 Zha 引入了两个四阶的通量和一个判断通量光滑/间断的判别器来提高过渡点精度。Shen 等人在更早的工作中 [138]，指出 Jiang 和 Shu 的经典的光滑因子  $IS_K$  在极值点不能满足  $\beta_k = D(1+O(\Delta^2))$  条件，并提出一种逐阶的重构方法来满足上述条件。但是这一方法在极值点并不满足五阶收敛的充分必要条件 [100]。

本章我们基于 [112] 的分析，提出了多步加权的思想，并结合 WENO-Z 格式及映射函数，给出了一个新的多步加权五阶 WENO 格式。该格式通过提高过渡点的精度，从而改进了近激波区域的计算精度，为研究激波/复杂流动干扰问题（如激波/边界层干扰引起的分离与再附、激波/涡干扰等）的研究提供了一个有效的数值方法。

## 2.1 本章涉及的数值方法

本节中，我们将给出本章涉及到的数值方法的具体表达形式，后文中也会经常应用到这些方法。

### 2.1.1 Lax-Friedrichs (LF) 通量分裂方法和空间半离散

引言1.3.2.2 中介绍了各类近似黎曼求解器，在流通矢量分裂方法中，LF 分裂方法形式最为简单，具有很好的稳定性，因此较为常用 [101, 117, 223]。

对于双曲律方程，为了实现迎风性，流通矢量方法通常将通量函数表达为正负通量之和的形式，以一维方程为例：

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0 \quad (2.1)$$

可以将通量  $f(u)$  分裂为正负通量的和的形式

$$f(u) = \frac{1}{2}(f^+(u) + f^-(u)) \quad (2.2)$$

LF 方法给出的正负通量为

$$f^\pm(u) = f(u) \pm \lambda_{max}u \quad (2.3)$$

其中  $\lambda_{max}$  是雅克比矩阵  $\frac{\partial f}{\partial u}$  的当地最大特征值。

方程 (2.1) 的空间半离散形式为

$$\frac{du_i(t)}{dt} = -\frac{1}{\Delta x}(h_{i+1/2} - h_{i-1/2}) \quad (2.4)$$

其中  $h_{i+1/2} = h_{i+1/2}^+ + h_{i+1/2}^-$ 。本文中，我们仅构造  $h_{i+1/2}^+$  通量，为了简便，文中省略掉了上标 ‘+’， $h_{i+1/2}^-$  的构造遵从相似的规律。

### 2.1.2 加权基本无振荡/WENO 格式 [100, 108, 223]

五阶 WENO 格式的通量为

$$h_{i+1/2} = \sum_{k=0}^2 \omega_k q_k \quad (2.5)$$

其中,  $q_k$  是子模板  $S_k^3 = (x_{i+k-2}, x_{i+k-1}, x_{i+k})$  上的三阶通量

$$\left\{ \begin{array}{l} q_0 = \frac{1}{3}f_{i-2} - \frac{7}{6}f_{i-1} + \frac{11}{6}f_i \\ q_1 = -\frac{1}{6}f_{i-1} + \frac{5}{6}f_i + \frac{1}{3}f_{i+1} \\ q_2 = \frac{1}{3}f_i + \frac{5}{6}f_{i+1} - \frac{1}{6}f_{i+2} \end{array} \right. \quad (2.6)$$

模板权重  $\omega_k$  为

$$\omega_k = \frac{\alpha_k}{\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2} \quad (2.7)$$

其中

$$\alpha_k = \frac{c_k}{(\varepsilon + IS_k)^p} \quad (2.8)$$

$IS_k$  是子模板  $S_k^3$  的光滑度量因子。在文献 [222] 中, Jiang 和 Shu 建议  $IS_k$  选取为

$$IS_k = \sum_{l=1}^2 \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \Delta x^{2l-1} \left[ q_k^{(l)}(x) \right]^2 dx \quad (2.9)$$

公式 (2.9) 的泰勒展开为

$$\left\{ \begin{array}{l} IS_0 = \frac{13}{12}(f_{i-2} - 2f_{i-1} + f_i)^2 + \frac{1}{4}(f_{i-2} - 4f_{i-1} + 3f_i)^2 \\ IS_1 = \frac{13}{12}(f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1})^2 + \frac{1}{4}(f_{i-1} - f_{i+1})^2 \\ IS_2 = \frac{13}{12}(f_i - 2f_{i+1} + f_{i+2})^2 + \frac{1}{4}(3f_i - 4f_{i+1} + f_{i+2})^2 \end{array} \right. \quad (2.10)$$

其中  $c_0 = 0.3$ ,  $c_1 = 0.6$ ,  $c_2 = 0.1$  是构造五阶迎风格式的线性最优权重。如果  $f'_i = 0$ , 公式 (2.10) 中的  $IS_k = D(1 + O(\Delta x))$ ,  $\omega_k = c_k + O(\Delta x)$  不符合格式所要求的收敛精度 [100, 138, 223]。

Henrick 等人 [100] 详细的分析了 Jiang 和 Shu 的 WENO 格式的精度, 认为格式达到五阶收敛需要满足如下的条件

$$\sum_{k=0}^2 A_k (\omega_k^+ - \omega_k^-) = O(\Delta x^3) \quad (2.11)$$

$$\omega_k^\pm - c_k = O(\Delta x^2)$$

其中  $A_k$  为  $q_k$  的泰勒展开中三阶项 ( $\Delta x^3$ ) 的系数 [100]。为了满足前面的条件，提高系数  $\omega_k$  的权重，映射函数  $g_k(\omega)$  定义为

$$g_k(\omega) = \frac{\omega(c_k + c_k^2 - 3c_k\omega + \omega^2)}{c_k^2 + \omega(1 - 2c_k)} \quad (2.12)$$

WENO-M 格式过  $g_k(\omega)$  生成新的权重，该格式可以在极值点达到五阶收敛精度。

在文章 [223] 中，Borges 等人提出了五阶收敛充分条件：

$$\omega_k^\pm - c_k = O(\Delta x^3) \quad (2.13)$$

并引入了一个系数  $\tau_5$

$$\tau_5 = |IS_0 - IS_2| \quad (2.14)$$

通过  $\tau_5$  可以构造新的光滑因子

$$IS_k^z = \frac{IS_k + \varepsilon}{IS_k + \tau_5 + \varepsilon} \quad (2.15)$$

采用新的  $IS_k^z$  构造的新的 WENO 格式—WENO-Z 格式在极值点满足条件收敛条件(2.13)。

本文中， $\varepsilon$  是为了防止分母为零而增加的小参数，在文章 [222] 中， $\varepsilon = 10^{-6}$ ，在文章 [100, 223] 中， $\varepsilon = 10^{-40}$ 。公式 (2.8) 中的  $p$  的作用是增加间断区权重系数间的差距。

### 2.1.3 Runge-Kutta 时间方法

在引言 1.3.2.3 中我们简单回顾了各种时间方法的发展。目前在求解对流方程中应用最为广泛的是 Shu 根据对流方程的 TVD 性质发展的一套三阶显示 TVD Runge-Kutta 格式 [99]。对于如下方程

$$\frac{du}{dt} = L(u) \quad (2.16)$$

三阶 TVD Runge-Kutta 格式具体表达如下：

$$\begin{cases} u^{(1)} = u^n + \Delta t L(u^n) \\ u^{(2)} = \frac{3}{4}u^n + \frac{1}{4}u^{(1)} + \frac{1}{4}\Delta t L(u^{(1)}) \\ u^{n+1} = \frac{1}{3}u^n + \frac{2}{3}u^{(2)} + \frac{2}{3}\Delta t L(u^{(2)}) \end{cases} \quad (2.17)$$

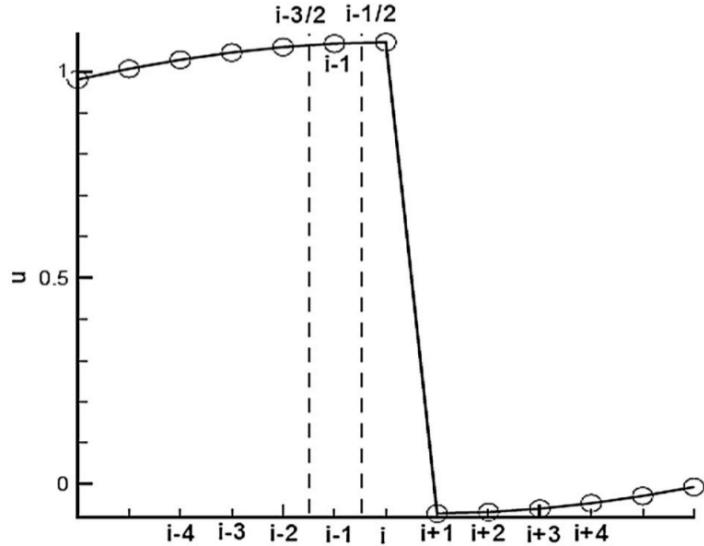


图 2.1 过渡点示意图 [112]

Figure 2.1 The sketch of transition point

## 2.2 过渡点精度分析 [112]

过渡点是连接光滑区和间断区的网格点，见前言 1.4.1。Shen 等人 [112] 分析了五阶 WENO 格式在过渡点的降阶问题，认为无论是 WENO-Z 格式还是 WENO-JS 格式在过渡点都只有三阶精度，然而该分析存在一些问题，其实该点只有二阶精度，以下我们将给出更为准确的分析。

图 2.1 中，点  $i$  和点  $i+1$  是两个间断点，点  $i-1$  和点  $i+2$  被称作过渡点，以  $i-1$  点为例，在该点，模板

$$S_{(i-1)-1/2}^5 = (x_{i-4}, x_{i-3}, \dots, x_i)$$

是光滑模板。因此， $h_{(i-1)-1/2}$  通过 WENO-Z 或者 WENO-JS 格式可以得到一个五阶通量。然而对于模板

$$S_{(i-1)+1/2}^5 = (x_{i-3}, x_{i-2}, \dots, x_{i+1})$$

由于在子模板  $S_2^3 = (x_{i-1}, x_i, x_{i+1})$  上存在间断，所以无论采用了 WENO-Z 还是 WENO-JS 总有

$$IS_2 \gg IS_0, IS_1$$

在计算通量  $h_{(i-1)+1/2}$  时有

$$\omega_0 \rightarrow \frac{1}{7}, \omega_1 \rightarrow \frac{6}{7}, \omega_2 \rightarrow 0$$

在  $\Delta x \rightarrow 0$  时  $h_{(i-1)-1/2}$  和  $h_{(i-1)+1/2}$  分别为

$$h_{(i-1)-1/2} = \frac{1}{30}f_{i-4} - \frac{13}{60}f_{i-3} + \frac{47}{60}f_{i-2} + \frac{9}{20}f_{i-1} - \frac{1}{20}f_i$$

和

$$h_{(i-1)+1/2} = \frac{1}{21}f_{i-3} - \frac{13}{42}f_{i-2} + \frac{41}{42}f_{i-1} - \frac{2}{7}f_i$$

(原文中  $f_{i-3}$  前系数为  $1/20$ )。应用泰勒分析有

$$\frac{1}{\Delta x}(h_{(i-1)+\frac{1}{2}} - h_{(i-1)-\frac{1}{2}}) = f'_{i-1} + O(\Delta x^2)$$

(原文中为  $O(\Delta x^3)$ )，同样的情况也会发生在下游的点  $i+2$ 。

由于过渡点仍然属于光滑区域，因此该点的半点通量应该分别达到四阶和五阶，而一阶导数精度应该达到三阶（[112] 中为四阶）。

为了提高过渡点的精度，在文献 [112] 中，提出了一套新的重构方法

$$h_{i+1/2} = \begin{cases} q_0^4, & \text{if } \tau_4^0 \leq \min(IS_k) \text{ and } \tau_4^1 \geq \min(IS_k) \\ q_1^4, & \text{if } \tau_4^1 \geq \min(IS_k) \text{ and } \tau_4^0 \leq \min(IS_k) \\ h^{\text{WENO-Z}}, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.18)$$

其中，

$$\begin{cases} q_0^4 = \frac{1}{12}(f_{i-2} - 5f_{i-1} + 13f_i + 3f_{i+1}) \\ q_1^4 = \frac{1}{12}(-f_{i-1} + 7f_i + 7f_{i+1} - f_{i+2}) \end{cases}$$

是两个四阶通量，可以通过方程 (2.6) 中两个三阶通量  $q_k$  组合得到

$$\begin{cases} q_0^4 = c_0^{4,0}q_0 + c_1^{4,0}q_1 \\ q_1^4 = c_0^{4,1}q_1 + c_1^{4,1}q_2 \end{cases}$$

系数  $c_k^{4,l}$  ( $k = 0, 1; l = 0, 1$ ) 分别为

$$c_0^{4,0} = 0.25, \quad c_1^{4,0} = 0.75; \quad c_0^{4,1} = 0.5, \quad c_1^{4,1} = 0.5$$

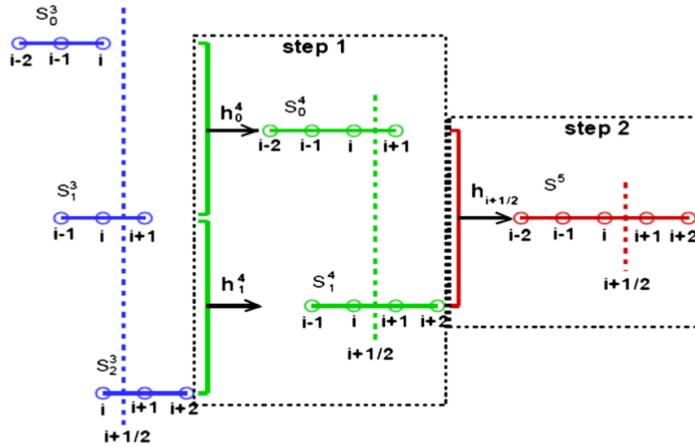


图 2.2 多步重构过程示意图

Figure 2.2 Multistep constructing process

其中  $\tau_4^0$  和  $\tau_4^1$  分别为

$$\begin{cases} \tau_4^0 = |IS_0 - IS_1| \\ \tau_4^1 = |IS_1 - IS_2| \end{cases}$$

尽管公式 (2.18) 中关于过渡点的计算并不十分精确，但是仍然可以有效的提高过渡点精度，并保持 ENO 的性质 [112]。

### 2.3 WENO 格式的多步加权方法

不同于公式 (2.18) 中的方法，本文中，我们结合了 Henrick 映射函数 [100]、WENO-Z 格式 [138] 和逐阶提高格式精度的思想 [112]，构造了一种新型的多步加权 WENO 方法。图 2.2 可以用来说明该方法构造过程。

第一步，构造如下两个四阶的加权通量

$$\begin{cases} h_0^4 = \omega_0^{4,0} q_0 + \omega_1^{4,0} q_1 \\ h_1^4 = \omega_0^{4,1} q_1 + \omega_1^{4,1} q_2 \end{cases} \quad (2.19)$$

权重系数  $\omega_k^{4,l}$  ( $k = 0, 1; l = 0, 1$ ) 通过结合 WENO-Z 和映射函数求得

$$\begin{aligned}\omega_k^{4,l} &= \frac{g_k(\phi_k^{4,l})}{\sum_k g_k(\phi_k^{4,l})}, \quad \phi_k^{4,l} = \frac{\alpha_k^{4,l}}{\sum_k \alpha_k^{4,l}} \\ \alpha_k^{4,l} &= c_k^{4,l} \left( 1 + \frac{\tau_4^l}{IS_{l+k} + \varepsilon} \right), \quad \tau_4^l = |IS_{l+1} - IS_l|\end{aligned}$$

其中最佳权重系数  $c_k^{4,l}$  ( $k = 0, 1, l = 0, 1$ ) 和公式 (2.18) 中相同。

第二步，通过以下方式构造最终的五阶模板

$$h_{i+1/2} = \omega_0 h_0^4 + \omega_1 h_1^4 \quad (2.20)$$

其中，

$$\begin{aligned}\omega_k &= \frac{g_k(\phi_k)}{\sum_k g_k(\phi_k)}, \quad \phi_k = \frac{\alpha_k}{\sum_k \alpha_k} \\ \alpha_k &= c_k^5 \left( 1 + \frac{\tau_5}{IS_{2k} + \varepsilon} \right), \quad \tau_5 = |IS_2 - IS_0|\end{aligned}$$

$c_0^5 = 0.4, c_1^5 = 0.6$  是通过两个四阶模板构造五阶迎风格式的最优线性权重。

下面我们分析新的格式，公式 (2.19) 和公式 (2.20) 的精度。通过泰勒展开可以得到

$$\tau_4^l = |f'_i f'''| \Delta x^4 + O(\Delta x^5)$$

因此有

$$\phi_k^{4,l} = \begin{cases} c_k^{4,l} + O(\Delta x^2), & \text{if } f'_i \neq 0 \\ c_k^{4,l} + O(\Delta x), & \text{if } f'_i = 0 \text{ and } f''_i \neq 0 \end{cases}$$

对其应用合适的映射函数  $g_k(\omega)$

$$g_k(\phi_k^{4,l}) = c_k^{4,l} + \frac{(\phi_k^{4,l} - c_k^{4,l})^3}{c_k^{4,l} - (c_k^{4,l})^3} + \dots$$

有

$$\omega_k^{4,l} = \begin{cases} c_k^{4,l} + O(\Delta x^6), & \text{if } f'_i \neq 0 \\ c_k^{4,l} + O(\Delta x^3), & \text{if } f'_i = 0 \text{ and } f''_i \neq 0 \end{cases} \quad (2.21)$$

同样可以得到

$$\omega_k = \begin{cases} c_k^5 + O(\Delta x^9), & \text{if } f'_i \neq 0 \\ c_k^5 + O(\Delta x^3), & \text{if } f'_i = 0 \text{ and } f''_i \neq 0 \end{cases} \quad (2.22)$$

因此，上文提到的第一和第二步加权过程中无论在  $f'_i \neq 0$  情况下还是在  $f'_i = 0$  和  $f''_i \neq 0$  情况下都满足条件 (2.11)。多步加权过程公式 (2.19) 和公式 (2.20) 在光滑区没有发生降阶。

如果  $i$  是过渡点（例如，间断介于点  $i+1$  和点  $i+2$  之间）。在第一步通过公式 (2.19) 可以得到四阶精度的半点通量  $h_0^4$ 。在第二步，由于  $IS_2 >> IS_0$  因此在公式 (2.20) 中有  $\omega_1 \rightarrow 0$ ，最后  $h_{i+1/2} \rightarrow h_0^4$ ，而  $h_{i-1/2} \rightarrow h_0^5$ 。因此，过渡点将有三阶精度。

要说明的是，计算公式 (2.19) 和公式 (2.20) 比起计算 WENO-Z 或者 WENO-M 需要更多的计算量，这是由于它需要同时求解六个权重系数。然而多步过程只在间断附近才需要，因此可以通过一些措施来减少计算量，比如通过有效的激波识别过程来确定非光滑模板并结合其它格式构造如下的杂交方法

$$h_{i+1/2} = \begin{cases} h_{i+1/2}^{\text{present}}, & \text{如果模板 } S_i^5 \text{ 是间断模板} \\ h_{i+1/2}^{\text{other}}, & \text{其它} \end{cases} \quad (2.23)$$

其中  $h_{i+1/2}^{\text{present}}$  代表当前的多步加权 WENO 格式， $h_{i+1/2}^{\text{other}}$  代表其它格式构造的结果。该部分将会在下一章间断识别方法中详细介绍。

## 2.4 数值算例

### 2.4.1 线性对流算例

线性对流方程如下，

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} = 0, & -1 \leq x \leq 1 \\ u(x, 0) = u_0(x), & \text{周期边界条件} \end{cases} \quad (2.24)$$

#### 1. 初始条件

$$u_0(x) = \sin\left(\pi x - \frac{\sin(\pi x)}{\pi}\right)$$

这一初始条件含有两个极值点，表 2.1 给出了不同格式的误差和精度。从中可以看出，在光滑区，新的方法可以保持和 WENO-Z 和 WENO-M 相同的精度，都能达到五阶。

表 2.1 不同格式精度对比,  $t = 2$ Table 2.1 Comparison of accuracy,  $T = 2$ 

Scheme	N	$L_1$ error	$L_1$ order	$L_\infty$ error	$L_\infty$ order
WENO-Z	40	0.217102e-3	—	0.677211e-4	—
	80	0.649393e-5	5.063	0.237405e-5	4.834
	160	0.204882e-6	4.986	0.785200e-7	4.918
	320	0.748874e-8	4.774	0.250232e-8	4.971
	640	0.364893e-9	4.359	0.779779e-10	5.004
WENO-M	40	0.210766e-3	—	0.672781e-4	—
	80	0.648426e-5	5.023	0.225867e-5	4.897
	160	0.204671e-6	4.986	0.720345e-7	4.971
	320	0.640983e-8	4.997	0.226830e-8	4.989
	640	0.200631e-9	4.998	0.710974e-10	4.996
present	40	0.203332e-3	—	0.714827e-4	—
	80	0.649369e-5	4.969	0.229242e-5	4.963
	160	0.204635e-6	4.988	0.724031e-7	4.985
	320	0.640982e-8	4.997	0.227140e-8	4.994
	640	0.200642e-9	4.998	0.711126e-10	4.997

## 2. 初始条件

$$u_0(x) = \begin{cases} -\sin(\pi x) - \frac{1}{2}x^3, & -1 < x \leq 0, \\ -\sin(\pi x) - \frac{1}{2}x^3 + 1, & 0 < x \leq 1, \end{cases} \quad (2.25)$$

图 2.3.a 中给出的是  $N = 200$  网格点在  $t = 6$  时刻的结果, 可以看出, 在间断附近, 新的方法得到的结果较 WENO-Z 或 WENO-M 都有更好的表现。图 2.3.b 给出的是当前格式和七阶 WENO (WENO-7) [101] 格式结果对比, 可以看到, 新的格式在间断附近的计算结果比 WENO-7 都要好。这也符合 2.3 节中的分析, 在过渡点  $i - 1$ , WENO-7 和新格式都有三阶精度, 但是在点  $i - 2$ , WENO-7 只有三阶精度, 而新的格式有五阶精度。

## 3. 初始条件

$$u_0(x) = \begin{cases} \frac{1}{6} (G(x, \beta, z-\delta) + G(x, \beta, z+\delta) + 4G(x, \beta, z)), & -0.8 \leq x \leq -0.6 \\ 1, & -0.4 \leq x \leq -0.2 \\ 1 - |10(x - 0.1)|, & 0 \leq x \leq 0.2 \\ \frac{1}{6} (F(x, \alpha, a-\delta) + F(x, \alpha, a+\delta) + 4F(x, \alpha, a)), & 0.4 \leq x \leq 0.6 \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.26)$$

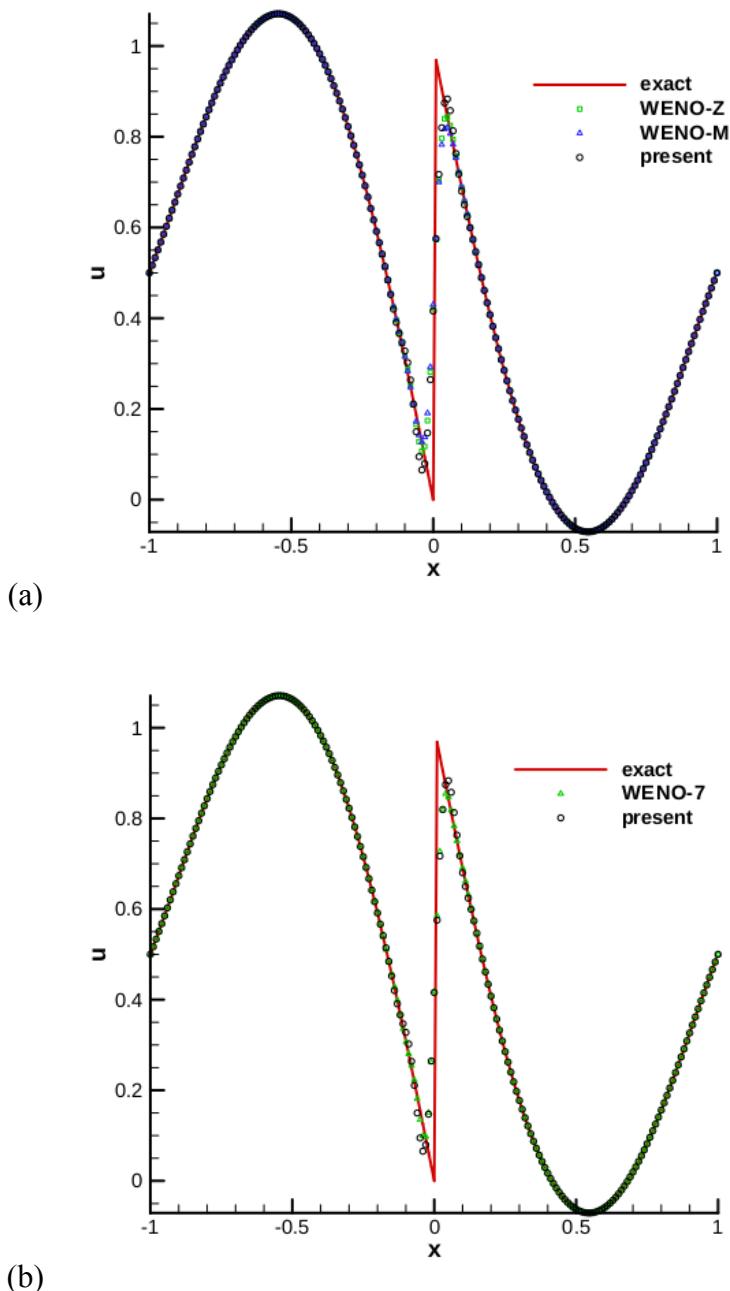


图 2.3 初始条件 (2.25) 下的计算结果对比,  $t = 6$

Figure 2.3 Numerical result with the initial solution Eq (2.25),  $t = 6$

其中

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

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

系数  $a = 0.5$ ,  $z = -0.7$ ,  $\delta = 0.05$  和  $\beta = \log 2 / 36\delta^2$ 。理论解中包含一个光滑的高斯波、一个方波、一个三角波和一个半椭圆波。在图 2.4.a 和图 2.4.b 中给出了新格式和五阶 WENO-Z 以及 WENO-M 格式计算结果对比。可以看到新方法的确可以提高间断附近的数值表现。在图 2.4.a 和图 2.4.b 中给出了新格式和 WENO-7 格式对比, 和上一个算例相同, 在含间断的区域以及椭圆波区域新方法都比七阶格式计算的更准确。

#### 2.4.2 非线性对流算例

在该小结我们研究如下非线性对流方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad 0 \leq x \leq 2\pi \quad (2.27)$$

初始条件为

$$u_0(x) = 0.3 + 0.7\sin(x), \quad 0 \leq x \leq 2\pi, \quad \text{周期边界条件}$$

该算例中, 通量分裂采用  $f^\pm = (f \pm au)/2$ , 其中  $f = u^2/2$ ,  $a = \max(u_i)$ 。图 2.6 给出在  $N = 80$  网格下  $t = 2$  时刻的计算结果, 可以看到相比于 WENO-Z 和 WENO-M 格式, 新的格式的计算结果在间断附近更接近参考解。

#### 2.4.3 一维激波管算例

我们在引言 1.1.1 中给出二维的 Euler 方程系统, 而一维的 Euler 方程为

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = 0 \quad (2.28)$$

其中  $\mathbf{U} = (\rho, \rho u, \rho E)^T$ ,  $\mathbf{F} = (\rho u, \rho u^2 + p, u(E + p))^T$ 。对于理想气体有  $p = (\gamma - 1)(E - \rho u^2)$ ,  $\gamma = 1.4$ 。

##### 1. Sod 激波管算例

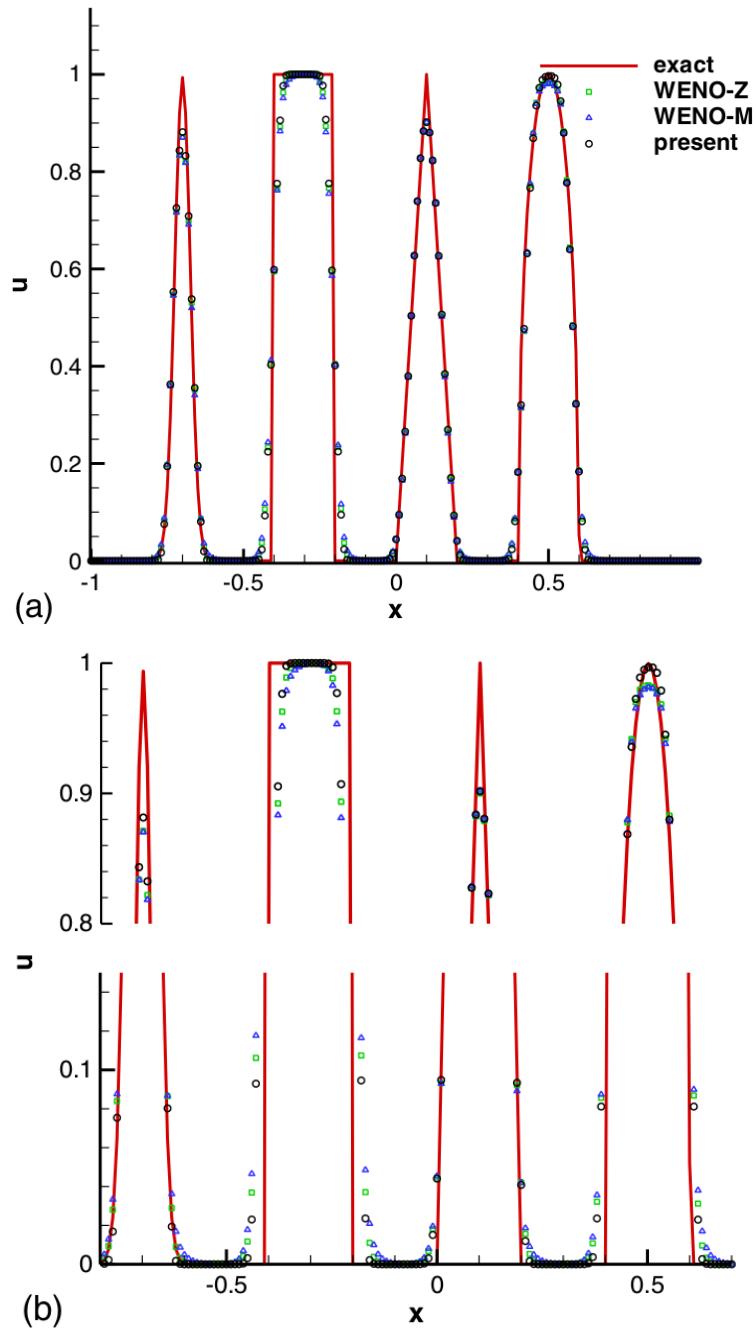


图 2.4 (a) 初始条件 2.26 下计算结果对比,  $t = 6$ , (b) 局部放大图

Figure 2.4 (a) Numerical results with the initial equation (2.26),  $t = 6$ , (b) Locally enlarged plot of Figure 2.4(a)

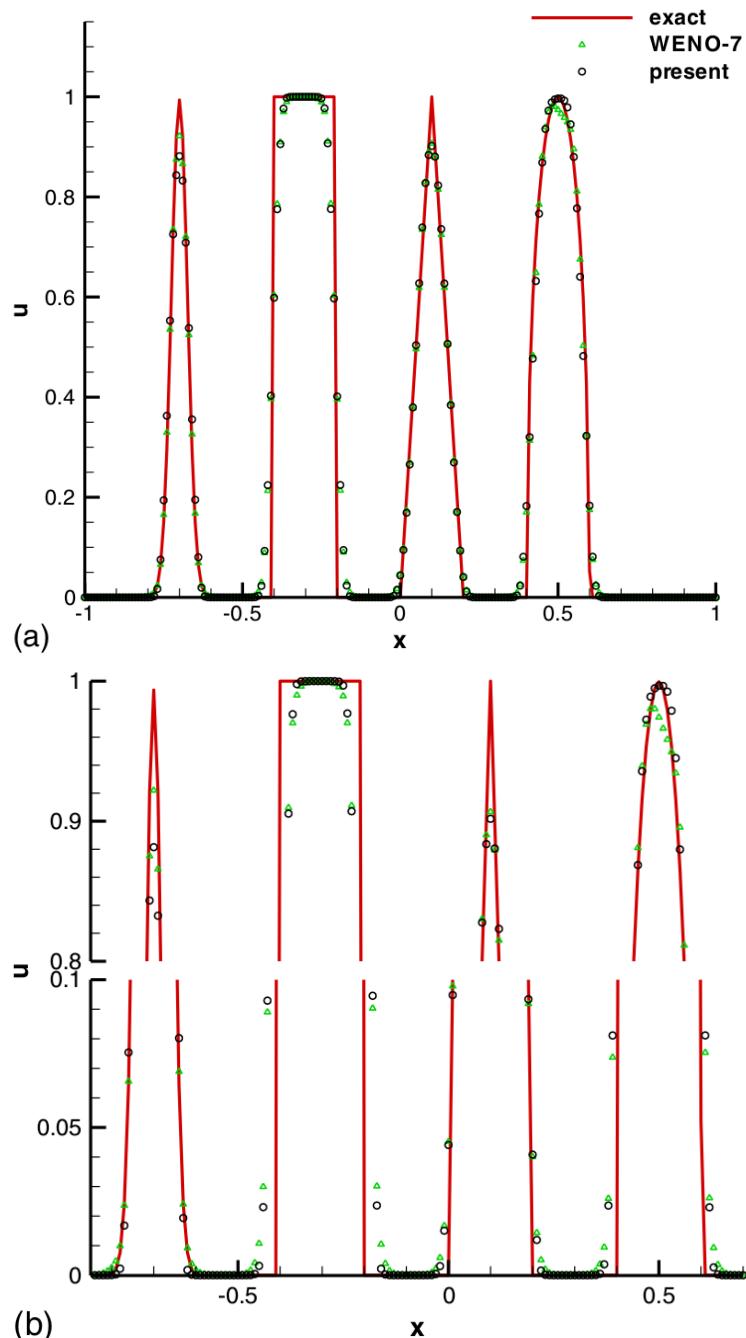


图 2.5 (a) 初始条件 (2.26) 下计算结果对比,  $t = 6$ , (b) 局部放大图

**Figure 2.5 (a)** Numerical results with the initial equation (2.26),  $t = 6$ , **(b)** Locally enlarged plot of Figure 2.5(a)

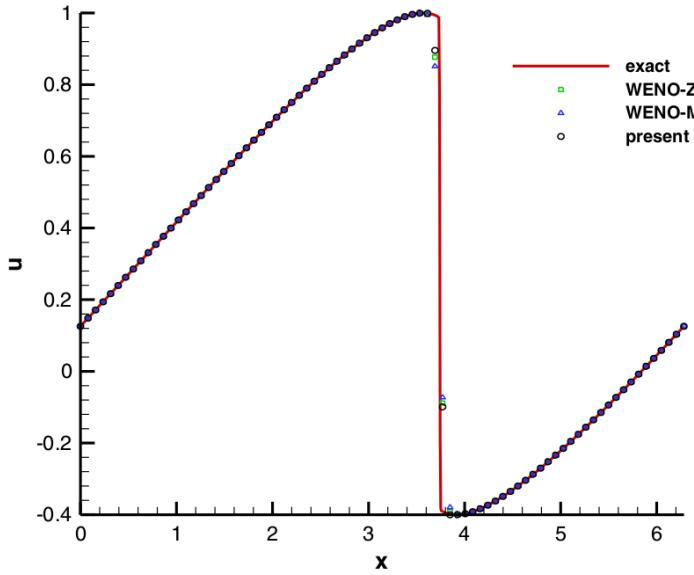


图 2.6 非线性对流方程 (2.27) 下计算结果对比,  $t = 2$

Figure 2.6 Numerical results of nonlinear transport equation (2.27),  $t = 2$

初始条件为

$$(\rho, u, p) = \begin{cases} (1, 0, 1), & x < 0 \\ (0.125, 0, 0.1), & x \geq 0 \end{cases}$$

图 2.7 给出了在  $N = 200$  网格下  $t = 0.14$  时刻的计算结果。可以看出，在激波附近，新的方法较 WENO-Z 和 WENO-M 更准确。

## 2. Lax 激波管算例

初始条件为

$$(\rho, u, p) = \begin{cases} (0.445, 0.698, 0.3528), & x < 0 \\ (0.500, 0.000, 0.5710), & x \geq 0 \end{cases}$$

图 2.8 给出了在  $N = 200$  网格下  $t = 1.3$  时刻的计算结果。在 Lax 激波管算例中，新的格式在间断附近的计算结果明显较其它五阶 WENO 格式更准确。

## 3. Shu-Osher 问题

初始条件为

$$(\rho, u, p) = \begin{cases} (3.857143, 2.629369, 10.33333), & \text{当 } x < -4 \\ (1 + \varepsilon \sin 5x, 0, 1), & \text{当 } x \geq -4 \end{cases}$$

这一算例模拟的是一道马赫数为 3 的激波和正弦熵波间的相互作用过程 [225]。图

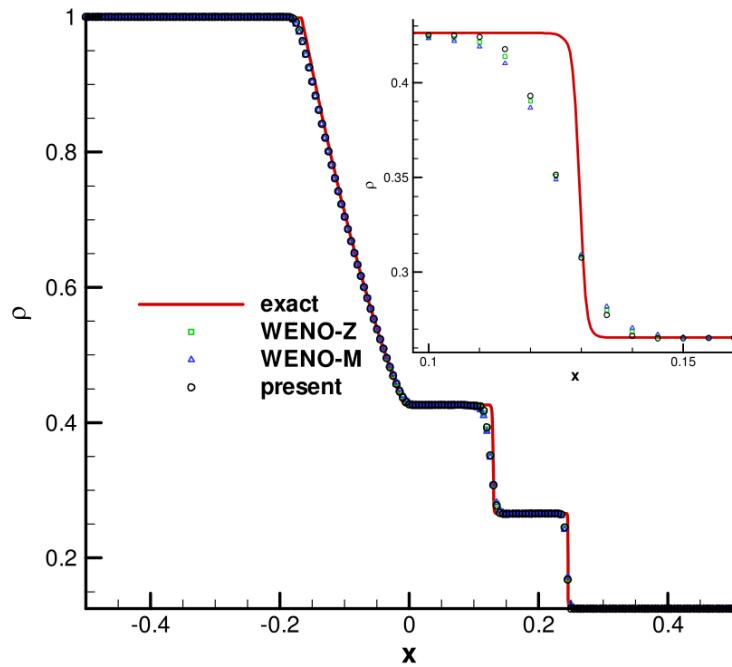


图 2.7 Sod 激波管, 密度,  $t = 0.14$

Figure 2.7 Density, Sod problem,  $t = 2$

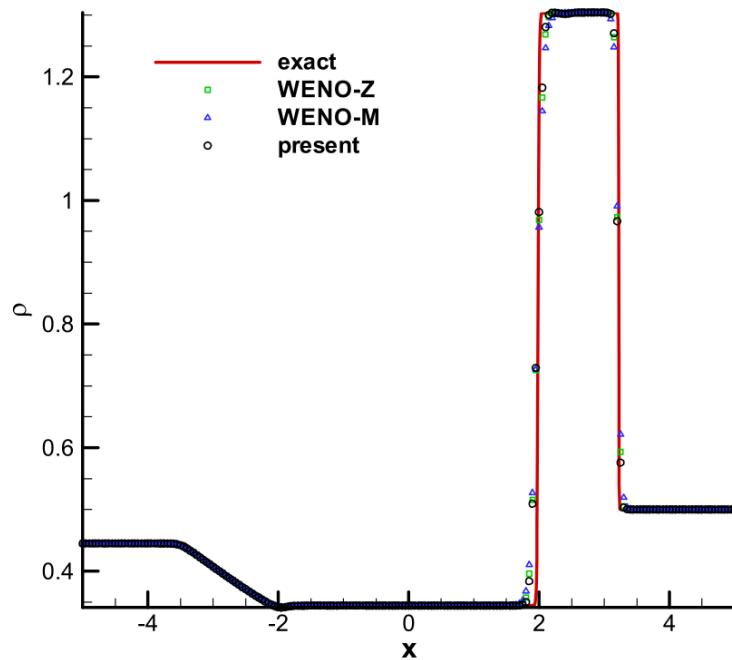
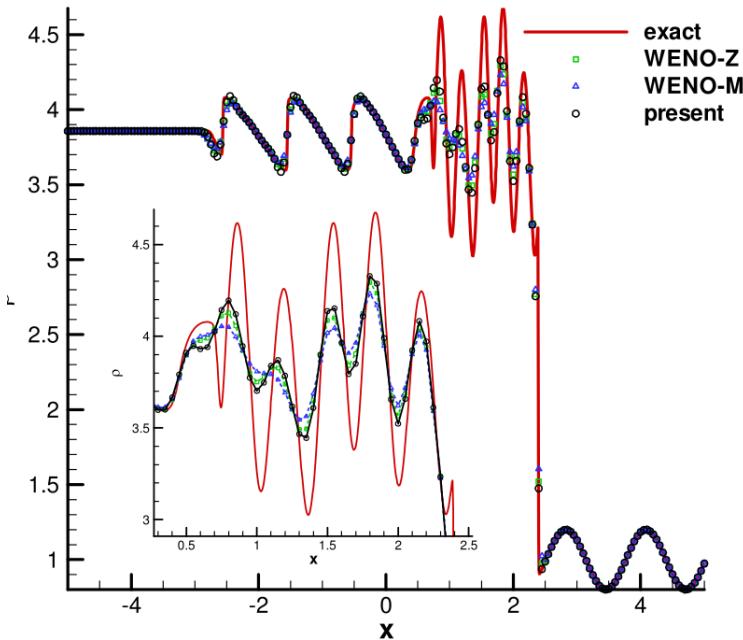


图 2.8 Lax 激波管, 密度,  $t = 1.3$

Figure 2.8 Density, Lax problem,  $t = 1.3$

图 2.9 Shu-Osher 问题算例, 密度,  $t = 1.8$ Figure 2.9 Density, Shu-Osher problem,  $t = 1.8$ 

2.9 给出  $N = 200$  网格下在  $t = 1.8$  时刻的计算结果。‘exact’ 结果是采用 WENO-Z 格式在  $N = 2000$  网格下计算得到的。图中可以看到采用了新格式, 即便是在光滑区也能达到更好的精度。这表明, 如果结果是剧烈变化的, 新方法具有更低的耗散。

图 2.10 给出了新的方法在不同网格 ( $N = 200$ ,  $N = 400$ ,  $N = 800$ ) 情况下计算结果, 可以看到, 采用  $N = 800$  网格的结果和 ‘exact’ 结果较好的吻合。也表明, 新的方法在计算复杂问题时具有较好的收敛特性。

#### 4. 冲击波相互作用算例

初始条件为

$$(\rho, u, p) = \begin{cases} (1, 0, 1000), & 0 \leq x < 0.1 \\ (1, 0, 0.1), & 0.1 \leq x < 0.9 \\ (1, 0, 100), & 0.9 \leq x \leq 1.0 \end{cases}$$

图 2.11 给出了在  $N = 400$  网格下  $t = 0.038$  时刻的计算结果, 通过结果对比表明, 新的格式可以较其它格式更好的捕捉强激波结构。

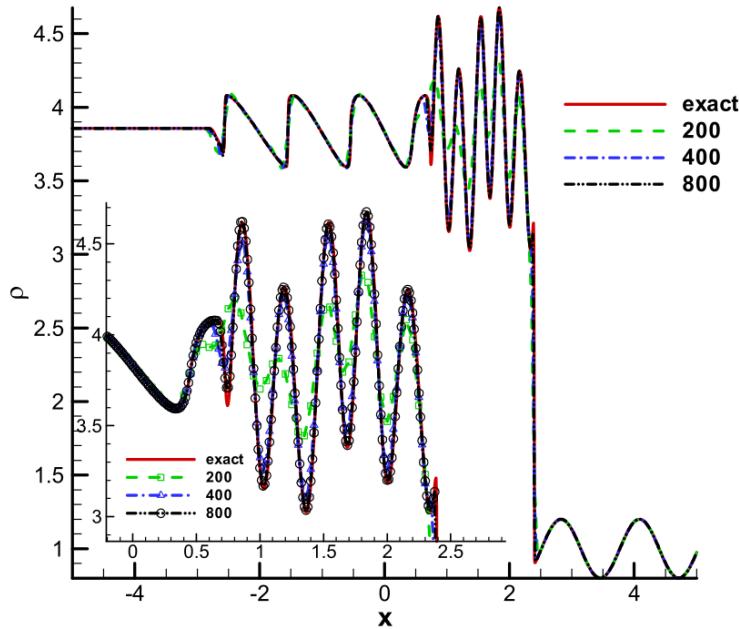


图 2.10 Shu-Osher 问题算例, 不同网格下的计算结果,  $t = 1.8$

Figure 2.10 Density, present method with different meshes, Shu-usher problem,  $t = 1.8$

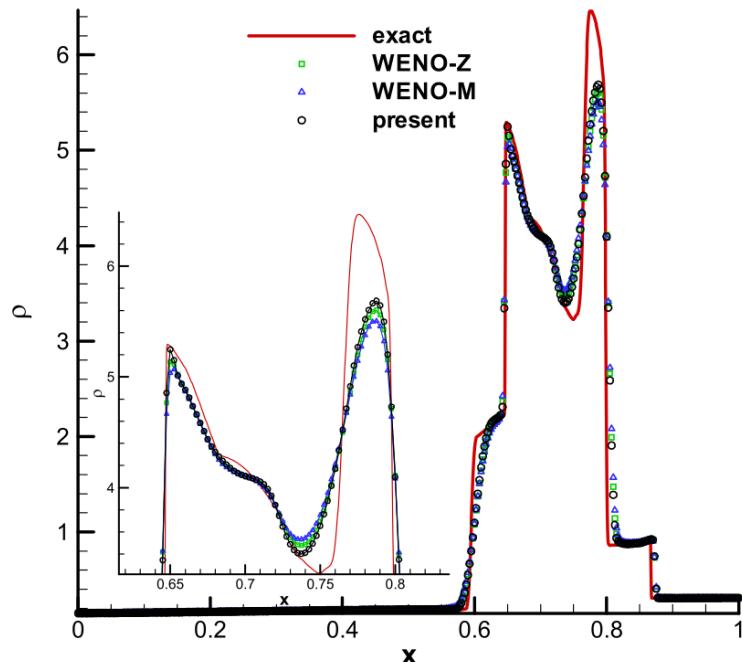


图 2.11 冲击波相互作用算例, 密度,  $t = 0.038$

Figure 2.11 Density, interacting blast waves problem,  $t = 0.038$

#### 2.4.4 二维对流传播方程

二维线性对流传播方程为

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} = 0, & -1 \leq x, y \leq 1 \\ u(x, y, 0) = u_0(x, y) \end{cases} \quad (2.29)$$

初始条件为  $u_0(x, y) = \sin(\pi(x + y))$ , 采用周期边界条件。表 2.2 中给出了不同格式的最大误差及平均误差, 从中可以看出, 对于光滑算例, 三种方法都能达到和一维光滑问题中相同的五阶精度。

**表 2.2 2D 线性对流传播方程算例中不同格式计算精度对比,  $T = 2$**

**Table 2.2 The accuracy in 2D case,  $t = 2$**

Scheme	N	$L_1$ error	$L_1$ order	$L_\infty$ error	$L_\infty$ order
WENO-Z	20	0.342283E-03	—	0.214133E-03	—
	40	0.102111E-04	5.067	0.637584E-05	5.746
	80	0.314224E-06	5.022	0.199111E-06	5.680
	160	0.979186E-08	5.004	0.622505E-08	5.658
	320	0.305789E-09	5.001	0.194579E-09	5.653
WENO-M	20	0.314390E-03	—	0.210032E-03	—
	40	0.995888E-05	4.980	0.636855E-05	5.625
	80	0.312491E-06	4.994	0.199092E-06	5.644
	160	0.977631E-08	4.998	0.622500E-08	5.650
	320	0.305630E-09	4.999	0.194578E-09	5.652
present	20	0.312598E-03	—	0.201245E-03	—
	40	0.995287E-05	4.973	0.635348E-05	4.985
	80	0.312471E-06	4.993	0.199062E-06	5.644
	160	0.977603E-08	4.998	0.622479E-08	5.650
	320	0.305600E-09	5.000	0.194560E-09	5.651

#### 2.4.5 二维变系数的线性对流方程算例

本算例采用的含有变系数的二维线性对流方程为

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(-yu)}{\partial x} + \frac{\partial(xu)}{\partial y} = 0, \quad -1 \leq x, y \leq 1 \quad (2.30)$$

边界条件为周期边界, 初始条件为一个高出其它位置一个单位, 半径为 0.5 的圆。这一问题模拟的是一个旋转的固体, 用来验证网格方向影响 (Grid orientation effect) [226, 227]。图 2.12.a 给出了在  $200 \times 200$  网格下  $t = 2$  时刻的计算结果。可以看到网格方向影响并不

严重, 图 2.12.b 给出坐标线  $x = -0.02, -0.48$  和  $-0.52$  上结果对比, 可以看出新的方法是三种格式中计算结果最好的。

#### 2.4.6 二维激波/涡相互作用算例

该算例我们采用二维 Euler 方程 (1.1), 问题描述的是一道静止的激波和运动的涡之间的相互作用 [222]。计算区域为  $[0, 2] \times [0, 1]$ 。初始时刻在  $x = 0.5$  有一道垂直于 x 轴, 波前马赫数为 1.1 的静止激波。激波左侧状态为  $(\rho, u, v, p) = (1, 1.1, \sqrt{\gamma}, 0, 1)$ 。在激波左侧以  $(x_c, y_c) = (0.25, 0.5)$  为中心设置一个小涡, 涡采用速度  $(u, v)$ 、温度  $(T = p/\rho)$  和熵  $(S = \ln(p/\rho^\gamma))$  的扰动来描述:

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{u} = \varepsilon \tau e^{\alpha(1-\tau^2)} \sin \theta \\ \tilde{v} = -\varepsilon \tau e^{\alpha(1-\tau^2)} \cos \theta \\ \tilde{T} = -\frac{(\gamma-1)\varepsilon^2 e^{2\alpha(1-\tau^2)}}{4\alpha\gamma} \\ \tilde{S} = 0 \end{array} \right.$$

其中,  $\tau = r/r_c$ ,  $r = \sqrt{(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2}$ ,  $\varepsilon$  代表涡的强度,  $\alpha$  控制涡的衰减速度,  $r_c$  是涡最大强度的临界半径。采用和文献 [119, 222] 中相同的值,  $\varepsilon = 0.3$ ,  $r_c = 0.05$ ,  $\alpha = 0.204$ 。计算时间步选取为

$$\Delta t = \sigma \frac{\Delta t_x \Delta t_y}{\Delta t_x + \Delta t_y}, \text{ 其中 } \Delta x_t = \frac{\Delta x}{\max_{i,j}(|u_{i,j}| + c_{i,j})}, \Delta y_t = \frac{\Delta y}{\max_{i,j}(|v_{i,j}| + c_{i,j})} \quad (2.31)$$

公式中的  $c$  为声速,  $\sigma = 0.5$  是 Courant-Friedrichs-Lowy (CFL) 数。

图 2.13 给出新方法在  $t = 0.6$  时刻计算结果中的压力分布, 图 2.14 给出中轴线  $y = 0.5$  上的压力曲线对比结果和局部放大图。计算采用  $251 \times 101$  的网格, 其中参考解 ‘exact’ 为 WENO-Z 格式在  $2001 \times 401$  网格下的计算结果。从图中可以看出, 激波后, 在压力峰值, 新格式几乎可以达到和参考解相同的高度, 在压力波谷, 新方法也有较其它两种格式更好的表现。

图 2.15 给出新方法在  $251 \times 101$ ,  $501 \times 201$  和  $1001 \times 401$  不同网格下结果对比, 可以看到, 在精细的网格下, 结果很好的收敛到参考解。不同网格的压力峰值间的微小差异也表明, 即便在粗糙网格下该方法也只有非常小的耗散。

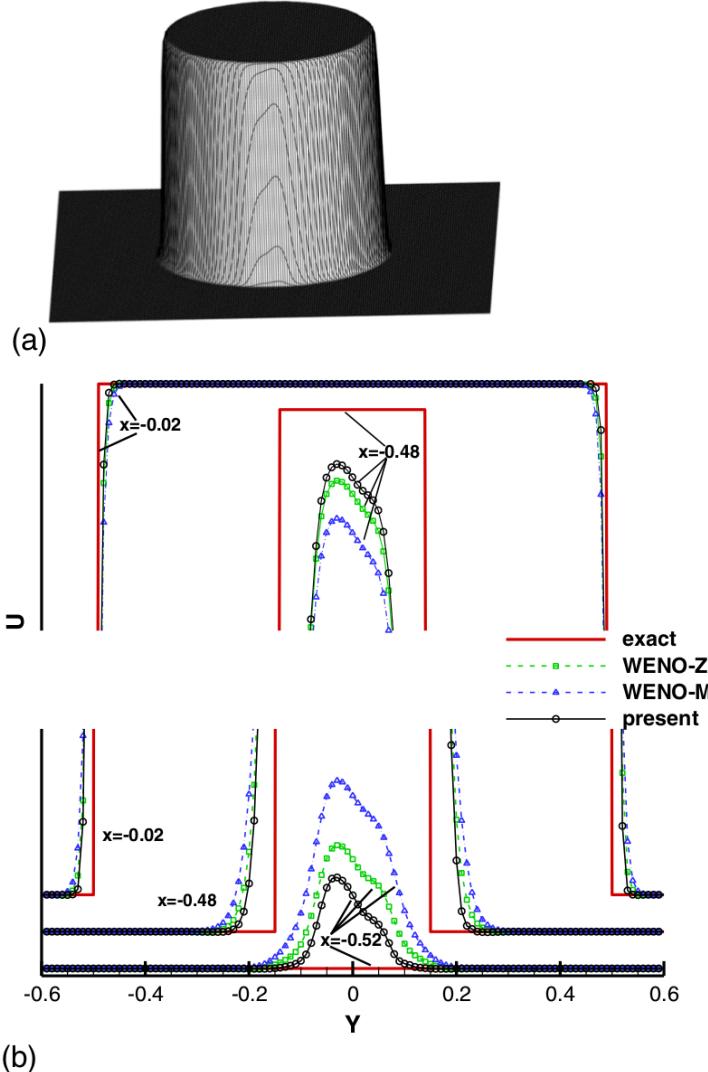


图 2.12 二维变系数线性对流方程 (2.30) 算例, (a) 新方法计算结果, (b) 直线  $x = -0.02, -0.48, -0.52$  上结果比较

Figure 2.12 (a) Numerical results of Equation (25), present scheme. (b) Comparisons along lines of  $x = -0.02, -0.48, -0.52$ , Equation (2.30)

#### 2.4.7 激波/剪切层相互作用算例

本小节我们通过一个激波/剪切层相互作用算例来进一步验证新方法的低耗散特性 [228]。该算例我们求解二维 Navier-Stokes 方程

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} = \frac{1}{\text{Re}} \left( \frac{\partial \mathbf{F}_v}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}_v}{\partial y} \right) \quad (2.32)$$

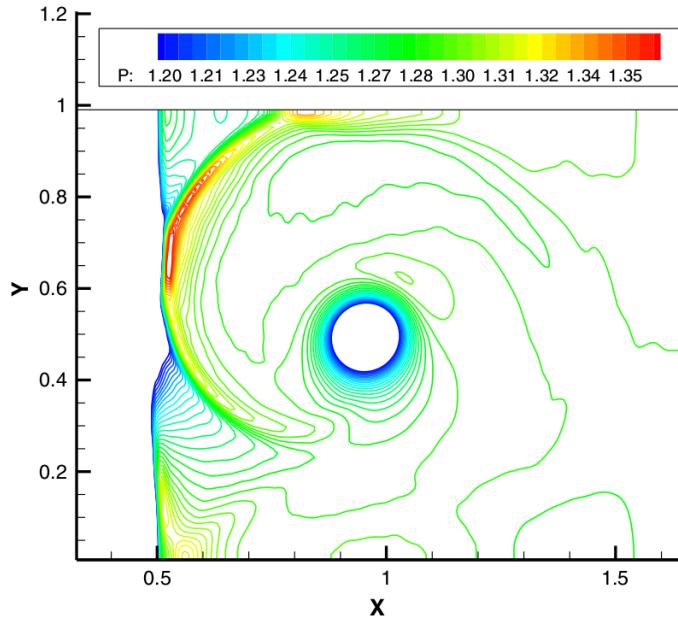


图 2.13 激波/涡相互作用算例，压力分布

Figure 2.13 The pressure contours of present method, shock/vortex interaction problem

其中,

$$\begin{aligned} \mathbf{U} &= \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho e \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho u v \\ (\rho e + p)u \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho u v \\ \rho v^2 + p \\ (\rho e + p)v \end{pmatrix} \\ \mathbf{F}_v &= \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ u\tau_{xx} + v\tau_{xy} + q_x \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}_v = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yy} \\ u\tau_{xy} + v\tau_{yy} + q_y \end{pmatrix} \end{aligned}$$

以及  $\tau_{xx} = \frac{2}{3}\mu(2u_x - v_y)$ ,  $\tau_{xy} = \frac{2}{3}\mu(u_y + v_x)$ ,  $\tau_{yy} = \frac{2}{3}\mu(2v_y - u_x)$ ,  $q_x = \mu T_x / [(\gamma - 1)M^2 \text{Pr}]$ ,  $q_y = \mu T_y / [(\gamma - 1)M^2 \text{Pr}]$ ,  $p = (\gamma - 1)(\rho e - \rho u^2/2)$ ,  $\gamma = 1.4$ 。

在该算例中, 由于剪切层穿过激波形成的不稳定性会引起一系列涡。计算开始时, 一道角度为  $\theta = 12^\circ$  马赫数为 0.5 的斜激波作用在混合边界层上。计算区域为  $[x, y] = [0, 200] \times [-20, 20]$ , 入流速度通过一个双曲正切函数给出

$$u = 2.5 + 0.5 \tanh(2y)$$

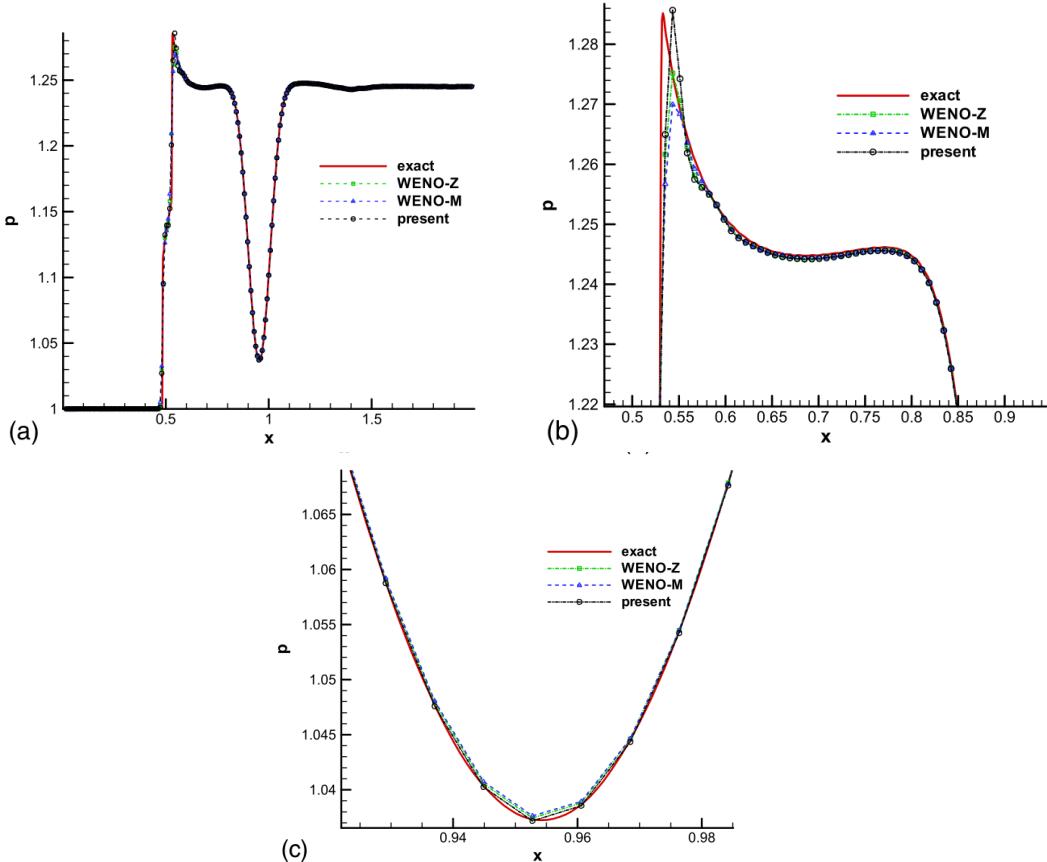


图 2.14 激波/涡相互作用算例, (a) 中轴线  $y = 0.5$  上压力分布, (b) 波峰局部放大图, (c) 波谷局部放大图

Figure 2.14 (a) The pressure distribution along the center line of  $y = 0.5$ , (b) locally enlarged plot of Figure 2.14 (a), and (c) locally enlarged plot of Figure 2.14 (a)

上层流体  $\rho_u = 1.6374$ ,  $p_u = 0.3327$ ; 下层流体,  $\rho_l = 0.3626$ ,  $p_l = 0.3327$ 。上层流体选取的是激波后的参数。下壁面采用滑移条件。在入流速度  $v$  上加入脉动量

$$v' = \sum_{k=1}^2 a_k \cos(2\pi kt/T + \phi_k) \exp(-y^2/b)$$

周期为  $T = \lambda/u_c$ , 波长为  $\lambda = 30$ , 对流速度  $u_c = 2.68$ ,  $b = 10$ ,  $a_1 = a_2 = 0.05$ ,  $\phi_2 = \pi/2$ 。普朗特数  $\text{Pr} = 0.72$ , 雷诺数  $\text{Re} = 500$ 。黏性项采用四阶中心格式 [229], 网格统一采用  $321 \times 81$ , 时间步长同样通过公式 (2.31) 求得。图 2.17 给出密度分布, 可以看到三种方法都能很好的求解该问题, 但是对于涡, 尤其是后面的四个, 新的方法比其它两种方法捕捉的都更清晰。

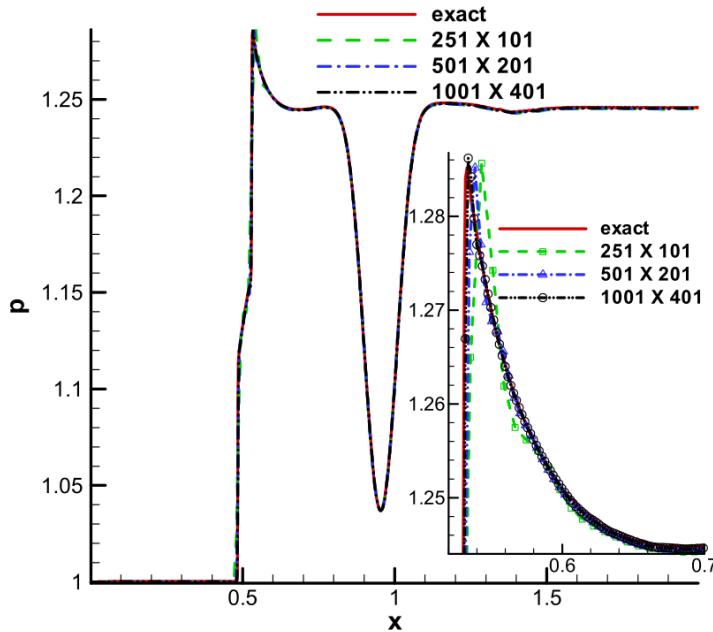


图 2.15 激波/涡相互作用算例不同网格下计算结果，中轴线  $y = 0.5$  上压力分布及局部放大图

Figure 2.15 The pressure distribution along the center line of  $y = 0.5$ , present method

## 2.5 小结

结合 Henrick 的映射函数、WENO-Z 格式和多步加权的思想，本文构造了一种新型的多步加权 WENO 格式。新格式的构造中，每一步重构都满足五阶收敛的充分条件，因此最终得到的五阶格式在光滑区包括极值点都能到达五阶精度。该方法的突出优点是它可以提高 WENO 格式在过渡点的表现，因此，间断附近的数值耗散明显低于其它五阶 WENO 格式。一系列数值算例验证了该方法的有效性。

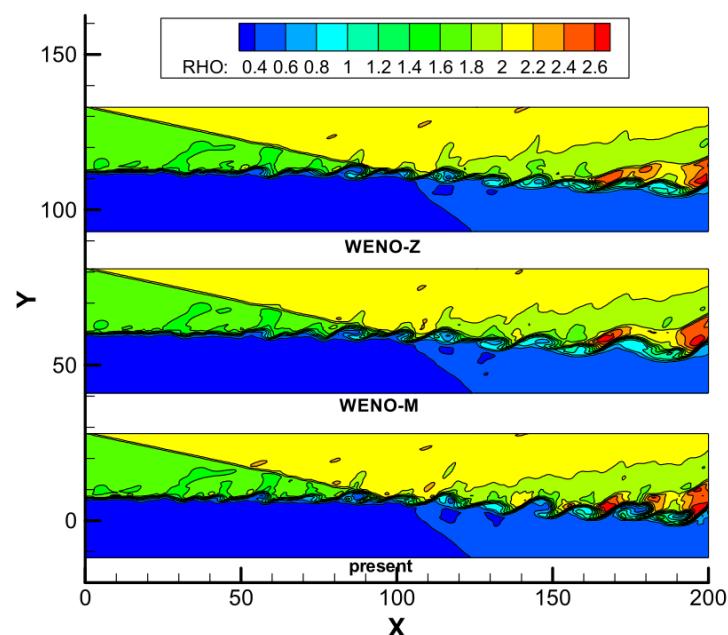


图 2.16 激波/剪切层相互作用算例, 密度等值线,  $t = 120$

Figure 2.17 The density contours, shock shear layer interaction problem,  $t = 120$



### 第三章 间断识别方法比较研究

在流场中，除了激波以外还存在着更多的光滑区域，其中同样有复杂的流场结构，尤其是一些容易被耗散掉的小尺度结构。因此需要数值方法既能高分辨率的捕捉激波又能高精度、低耗散的求解流场的光滑区域 [230]。在上一章中，我们提出了多步加权的思想，并构造了五阶多步加权 WENO 格式，进一步改善了 WENO 格式在间断附近区域的表现，提高了对激波的分辨能力。

尽管 WENO 格式在理论上可以构造到任意阶精度 [101, 102, 222]，然而近些年研究发现，在可压缩湍流的计算中 [105]，WENO 格式中的耗散仍然过大，会掩盖掉真实的物理黏性，造成对短波的分辨能力不足。为了避免这一问题，学者们发展了一系列杂交格式 (hybrid method)，如混合紧致-WENO 格式 [116, 117, 119, 231]，混合中心-WENO 格式 [114, 115] 和混合谱方法-WENO 格式 [118] 等。杂交格式的主要思想是在光滑区采用高精度低耗散格式，在间断区采用 WENO 类激波捕捉格式，其中最关键的问题是如何准确的识别激波。

最近，Li 和 Qiu [232] 在 WENO-迎风格式中比较了多种间断识别方法。Shen 和 Zha [119] 发展了一种基于模板光滑因子（整体/局部关系）的激波识别方法。该识别方法无人为的或和问题相关的自由参数，其有效性在文 [119] 中得到了验证。

在本章中，我们通过算例比较研究不同的间断识别方法 [119, 232, 233]，对它们进行评测，并从中找出最为有效的方法。

#### 3.1 有限紧致格式 (Finite compact scheme)

有限紧致格式是一种结合了 WENO 格式和紧致格式的杂交格式，该格式将间断当成流场的内边界，进而将流场分成有限个光滑区域。有限紧致格式具体的构造思想为：

- (1) 首先通过间断识别方法识别出间断模板，该模板和边界都采用 WENO 格式构造通量。
- (2) 将介于两个间断区域之间（或者介于边界和间断区域之间）的模板定义为紧致模板，并采用紧致格式构造通量。

注意在第 (1) 步中构造的间断通量将自动的作为构造紧致格式的内边界公式。

图 (3.1) 给出有限紧致格式的示意图，其中  $M$  为紧致模板个数。在应用有限紧致格式求解中，需要一个用来定义光滑区域起始点和终止点的数组。有限紧致格式具体构造

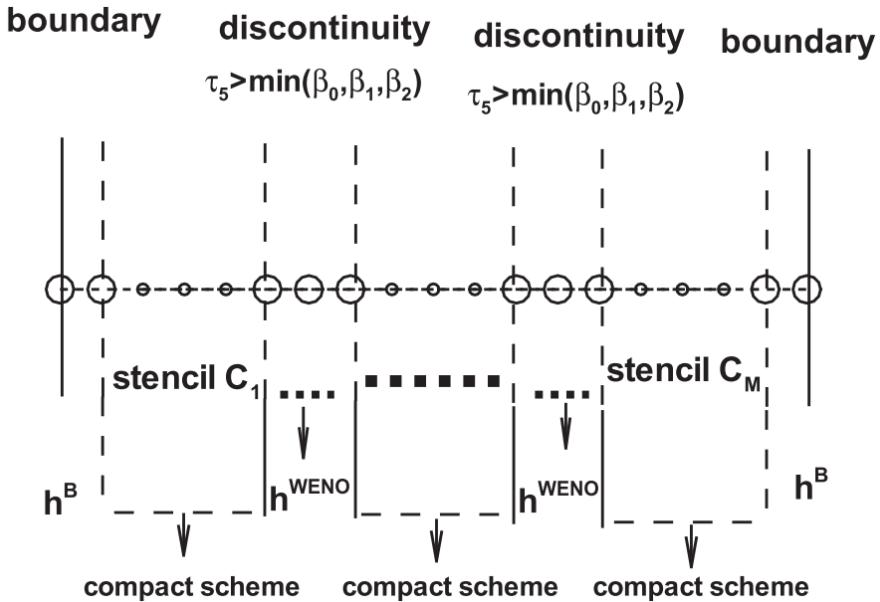


图 3.1 有限紧致格式示意图

Figure 3.1 The sketch of finite compact scheme

细节如下：

第 0 步：采用边界条件计算  $h_{1/2}$  和  $h_{N+1/2}$

第 1 步： $M = 1$  ! 搜寻第 M 个光滑区域的起始点和终止点

start\_point( $M$ ) = 1 ! 第 M 光滑区域的起始点

DO  $i = 1, N - 1$  ! 对模板  $S_i$  采用间断识别方法

IF ( $S_i$  是间断模板) THEN

end\_point( $M$ ) =  $i$  ! 第 M 光滑区域的终止点

$M = M + 1$

start\_point =  $i + 1$

采用激波捕捉格式计算  $h_{i+1/2}$ :

$$h_{i+1/2} = \sum_{k=0}^2 \omega_k \hat{f}^k(x_{i+1/2})$$

END IF

END DO

end\_point( $M$ ) =  $N$

第 2 步：DO  $k = 1, M$  ! 采用紧致格式计算第 k 紧致模板（光滑区域）

DO  $i = \text{start\_point}(k), \text{end\_point}(k) - 1$

```

    计算紧致格式右端项  $d_{i+1/2}$ 
END DO
求解三对角紧致格式:
 $\alpha h_{i-1/2} + \gamma h_{i+1/2} + \beta h_{i+3/2} = d_{i+1/2}$ 
其中,  $i = \text{start\_point}(k), \dots, \text{end\_point}(k) - 1$ 
ENDDO

```

---

由于有限紧致具有优良特性, 本文将各种识别方法应用在有限紧致格式 [119] 中, 通过数值算例来验证它们的表现。

## 3.2 间断识别方法

### 3.2.1 SZ 识别方法 [119]

文 [119] 中提出一种基于模板光滑因子 (整体/局部关系) 的激波识别方法, 为了简便本文称其为 SZ 识别方法。

Borges 等人 [223] 在 WENO-Z 构造中引入了一个  $\tau_5$  (2.14) 用来构造更高阶光滑因子, Shen 和 Zha [119] 指出,  $\tau_5$  具有如下重要的性质:

- (1) 在模板  $S^5 = (x_{i-2}, x_{i-1}, \dots, x_{i+2})$  上, 如果不存在间断, 则  $\tau_5 \gg IS_k$  ( $k = 0, 1, 2$ )。
- (2) 如果在模板  $S^5$  上存在间断但在子模板  $S_k^3$  上光滑, 则对于光滑子模板有  $IS_k \gg \tau_5$ 。
- (3)  $\tau_5 \leq \max(IS_0, IS_1, IS_2)$ 。

根据这些性质, Shen 和 Zha [119] 构造的间断判别方法为: 如果  $\tau_5 > \min(IS_0, IS_1, IS_2)$ , 则模板  $S^5$  是一个间断模板。

### 3.2.2 平均总变差 (Average total variation/ATV) 识别方法

平均总变差方法 [232–234]:

$$|u_{j+1}^n - u_j^n| \geq \theta \frac{TV}{N}$$

则认为区间  $[x_j, x_{j+1}]$  内存在间断。其中 TV 代表  $t_n$  时刻的总变差

$$TV = TV(u^n) = \sum_j |u_{j+1}^n - u_j^n|$$

单元  $I_j$  ( $[x_{j-1/2}, x_{j+1/2}]$ ) 和单元  $I_{j+1}$  为间断单元。其中,  $\theta$  为问题相关参数, 文 [234] 指出,  $\theta$  应该介于 0 和 1 之间, 本文统一选用  $\theta = 0.3$ 。

### 3.2.3 基于 minmod 函数的 TVB 识别方法 [235]

为了便于表达, 我们首先在单元  $I_j$  上给出了一个二次多项式  $P_2(x)$  [232]

$$P_2(x) = u_j^{(0)} + u_j^{(1)} \frac{x - x_j}{\Delta x} + u_j^{(2)} \left[ \left( \frac{x - x_j}{\Delta x} \right)^2 - \frac{1}{12} \right] \quad (3.1)$$

其中  $I_j$  为  $x \in [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}]$ 。在单兀点上有

$$P_2(x_k) = u_k^n, \quad k = j-1, j, j+1$$

由此可以得到

$$u_j^{(0)} = \frac{1}{24}(u_{j-1}^n + 22u_j^n + u_{j+1}^n), \quad u_j^{(1)} = \frac{1}{2}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n), \quad u_j^{(2)} = \frac{1}{2}(u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n)$$

在 TVB 识别方法中, 首先定义

$$\tilde{u}_j = P_2(x_{j+1/2}) - u_j^{(0)}, \quad \tilde{\tilde{u}}_j = -P_2(x_{j-1/2}) + u_j^{(0)}$$

然后通过 minmod 函数进行修正

$$\begin{aligned} \tilde{u}_j^{(\text{mod})} &= \tilde{m}(\tilde{u}_j, u_{j+1}^{(0)} - u_j^{(0)}, u_j^{(0)} - u_{j-1}^{(0)}) \\ \tilde{\tilde{u}}_j^{(\text{mod})} &= \tilde{m}(\tilde{\tilde{u}}_j, u_{j+1}^{(0)} - u_j^{(0)}, u_j^{(0)} - u_{j-1}^{(0)}) \end{aligned}$$

其中  $\tilde{m}$  为

$$\tilde{m}(a_1, a_2, \dots, a_n) = \begin{cases} a_1 & \text{if } |a_1| \leq M(\Delta x)^2 \\ m(a_1, a_2, \dots, a_n) & \text{otherwise} \end{cases}$$

minmod 函数  $m$  为

$$m(a_1, a_2, \dots, a_n) = \begin{cases} s \cdot \min_{1 \leq j \leq n} |a_j| & \text{if } \text{sign}(a_1) = \text{sign}(a_2) = \dots = \text{sign}(a_n) = s \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3.2)$$

TVB 识别方法: 如果  $\tilde{u}_j^{(\text{mod})} \neq \tilde{u}_j$  或  $\tilde{\tilde{u}}_j^{(\text{mod})} \neq \tilde{\tilde{u}}_j$  则认为单元  $I_j$  为问题单元。

其中  $M$  为 TVB 识别方法中的一个问题相关参数，同样难以很好的给出，本文中我们采用 [235] 中给出的  $M$ :

$$M = \frac{2}{3} \max_J |u_{xx}^0|$$

### 3.2.4 XS 识别方法 [236]

Xu 和 Shu 在文章 [236] 中引入了一个强间断判别方法，该方法中定义了一个  $\phi_j$  函数

$$\phi_j = \frac{\beta_j}{\beta_j + \gamma_j}$$

其中

$$\alpha_j = (u_j^n - u_{j-1}^n)^2 + \varepsilon, \quad \beta_j = \left( \frac{\alpha_j}{\alpha_{j-1}} + \frac{\alpha_{j+1}}{\alpha_{j+2}} \right)^2, \quad \gamma_j = \frac{(u_{\max} - u_{\min})^2}{\alpha_j}$$

这里  $\varepsilon$  是一个防止分母为 0 的小系数。 $u_{\max}$  和  $u_{\min}$  为所有节点在  $t^n$  时刻， $u_j^n$  的最大值和最小值。在光滑区域有  $0 \leq \phi_i \leq 1$  和  $\phi_i = O(\Delta x)$ 。在间断区域  $\gamma_j \gg \beta_j$ ， $\phi_j$  趋近于 1。因此，我们认为  $\phi_j > (\Delta x)^2$  时单元  $I_j$  和单元  $I_{j+1}$  为间断单元。

### 3.2.5 Biswas, Devine 和 Flaherty 动量限制 (moment limiter) 方法 [237] (BDF)

该方法中定义

$$u_j^{(l),\text{mod}} = \frac{1}{2l-1} m \left( (2l-1)u_j^{(l)}, u_{j+1}^{(l-1)} - u_j^{(l-1)}, u_j^{(l-1)} - u_{j-1}^{(l-1)} \right), \quad l = 1, 2$$

其中  $m$  为公式 (3.2) 中的 minmod 函数。如果  $u_j^{(2),\text{mod}} \neq u_j^{(2)}$  认为  $I_j$  为间断单元。

### 3.2.6 KXRCF 间断识别方法 [238]

KXRCF 间断识别方法：

将单元  $I_j$  的边界分为入流边界  $\partial I_j^+$  和出流边界  $\partial I_j^-$  两部分，如果

$$\frac{\left| \int_{\partial I_j^-} (u^h|_{I_j} - u^h|_{I_{n_J}}) ds \right|}{h_j^{\frac{k+1}{2}} |\partial I_j^-| \|u^h|_{I_j}\|} \ll 1 \quad (3.3)$$

则认为  $I_j$  单元为间断单元。

公式 (3.3) 中  $h_j$  定义为单元  $I_j$  的半径,  $I_{n_j}$  为单元  $I_j$  出流边界  $\partial I_j^-$  的邻居单元。在结构网格中, 上面公式 (3.3) 可以简化为

$$\frac{u^h(-\frac{1}{2})|_j - u^h(\frac{1}{2})|_{j-1}|}{(\Delta x)^{3/2} \sqrt{\int_{-1/2}^{1/2} [u^h(x)]_j^2 dx}} \gg 1$$

其中

$$u^h(-\frac{1}{2})|_j = u_j^{(0)} - \frac{1}{2}u_j^{(1)} + \frac{1}{6}u_j^{(2)}$$

$$u^h(\frac{1}{2})|_{j-1} = u_{j-1}^{(0)} + \frac{1}{2}u_{j-1}^{(1)} + \frac{1}{6}u_{j-1}^{(2)}$$

$$\int_{-1/2}^{1/2} [u^h(x)]_j^2 dx = a^2 + \frac{b^2}{12} + \frac{c^2}{80} + \frac{ac}{6}$$

$a, b, c$  分别为

$$a = u_j^{(0)} - \frac{1}{12}u_j^{(2)}, \quad b = u_j^{(1)}, \quad c = u_j^{(2)}$$

### 3.3 数值算例

本文采用和上一章相同的 LF 通量分裂方法 (章节 2.1.1) 和三阶 Runge-Kutta 时间方法 (章节 2.1.3)。

#### 3.3.1 线性对流算例

该算例和算例 2.4.1 类似, 分别测试一个组合波算例和一个光滑正弦函数算例。控制方程同样采用 (2.24)。

##### 1. 初始条件

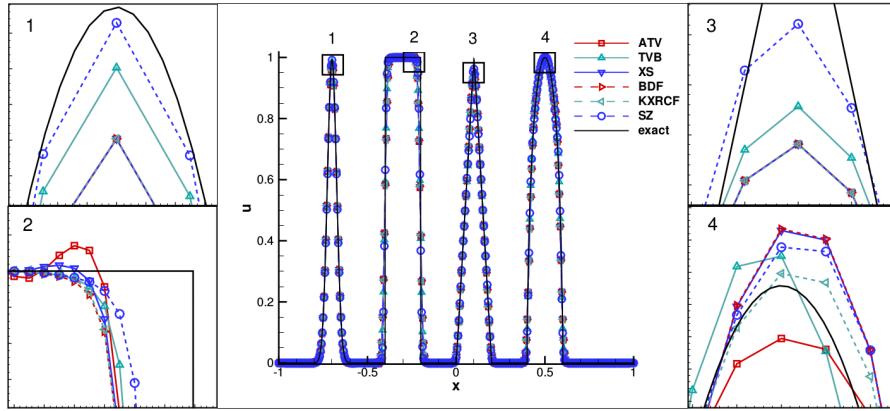
$$u_0(x) = \sin(\pi x)$$

该算例的解是完全光滑的, 如果间断识别方法完全准确, 结果应该无限接近紧致格式的计算结果。反之, 识别的越不准确, 会有越多的点被当成间断点计算, 也就越接近 WENO-Z 的结果。通过该算例可以考察不同间断识别方法对于光滑区误识别的问题。在表 3.1 中我们给出了 WENO-Z 格式、紧致格式和结合了不同识别方法的有限紧致格式计算结果的  $L_\infty$  误差。从中我们可以看到, 只有 TVB、KXRCF 和 SZ 识别方法的计算结果明显区别于 WENO-Z 格式, 其中利用 SZ 识别方法的计算结果和紧致格式相同。

表 3.1  $u_0(x) = \sin(\pi x)$  初始条件下，不同识别方法的计算误差， $T = 10$ ,  $\Delta x = 0.02$ 

 Table 3.1 Comparison of accuracy with the initial condition  $u_0(x) = \sin(\pi x)$ ,  $T = 10$ ,  $\Delta x = 0.02$ 

识别方法	$L_\infty$ 误差	识别方法	$L_\infty$ 误差
WENO-Z	6.613E-007	TVB	4.217E-007
BDF	6.613E-007	KXRCF	2.566E-007
XS	5.593E-007	SZ	2.071E-007
ATV	5.593E-007	紧致格式	2.071E-007


 图 3.2 有限紧致格式结合不同识别方法的组合波计算结果,  $t = 8.0$ 

## 2. 组合波算例

该算例初始条件为(2.26), 其中包含四种不同的波形, 可以用来验证识别方法对于不同间断波形的识别能力, 如果将间断误识别为光滑区域会引起数值振荡甚至发散。

图 3.2 给出结合了不同识别方法的有限紧致格式 (FC) 在  $t = 8$  时刻的计算结果及局部放大图, 我们可以看到除了 ATV 方法, 其它识别方法都能得到无振荡的计算结果。在高斯波、方波和三角波部分, SZ 识别方法具有最好的结果, 接下来是 TVB 识别方法。在椭圆波部分, KXRCF 具有最好的结果, 接下来是 SZ 识别方法。总体来说, SZ 识别方法具有最好的精度效果。

### 3.3.2 一维激波管算例

该部分采用一维欧拉方程 (2.28), 计算了 Lax 激波管问题、Shu-usher 激波管问题和爆炸波相互作用 (interacting blast wave) 问题。

#### 1. Lax 激波管问题

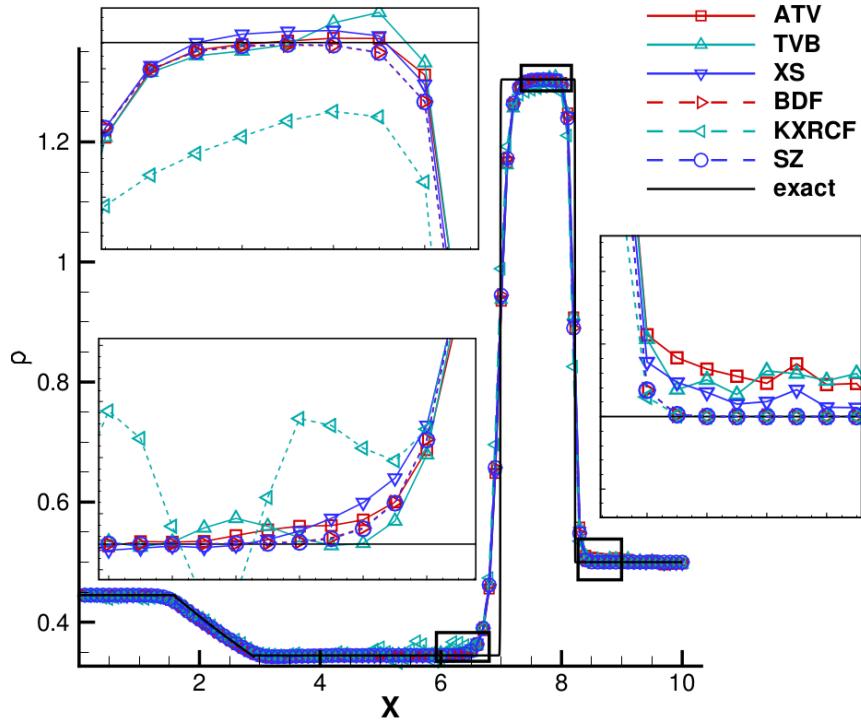


图 3.3 Lax 激波管算例，有限紧致格式结合不同识别方法，密度曲线， $t = 1.3$

Figure 3.3 Density, Lax problem,  $t = 1.3$

图 3.3 给出有限紧致格式结合不同识别方法在  $N = 200$  网格下的计算结果和局部放大图，可以看到 ATV、TVB 和 KXRCF 识别方法的结果都存在振荡，其中 KXRCF 振荡最为剧烈，SZ 识别方法具有最好的结果，BDF 方法也有不错的效果。

## 2. Shu-Osher 激波管问题

图 3.4 中给出不同识别方法在  $N = 200$  网格下计算结果和局部放大对比，总体来讲 SZ 识别方法在所有区域都有很好的表现，TVB 识别方法也具有较好的效果，KXRCF 识别方法和 BDF 识别方法分别在波峰和波谷表现良好。

## 3. 爆炸波相互作用 (interacting blast wave) 问题

图 3.5 给出  $N = 200$  网格  $t = 0.038$  时刻的计算结果，通过三个区域放大图可以看到，在极大值点 SZ 识别方法和 ATV 识别方法具有最好的表现，接下来是 TVB 识别方法。在极小值点 KXRCF 具有最好的效果，在大梯度的光滑区域，仍然是 SZ 识别方法计算效果最准确。

### 3.3.3 二维算例

接下来我们考虑二维 Euler 方程 (1.1) 算例。

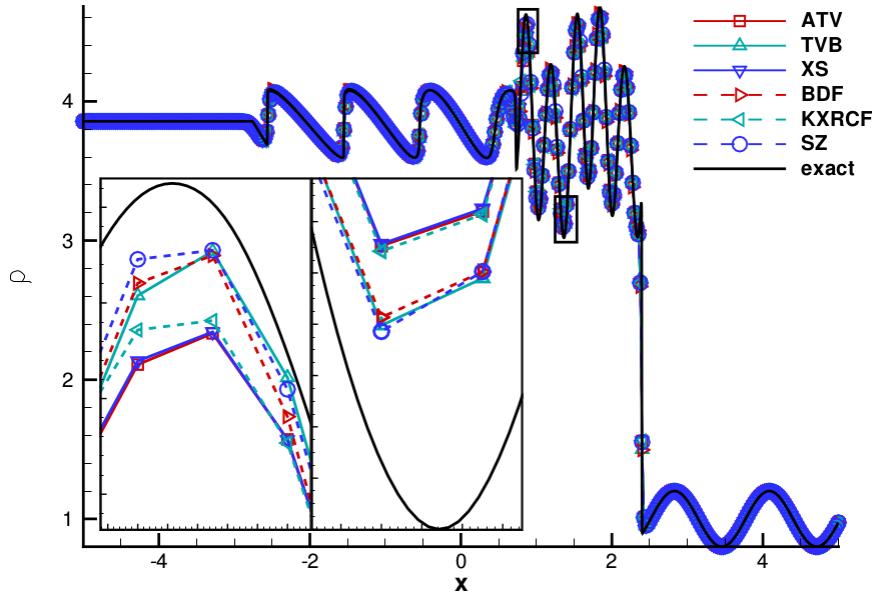


图 3.4 Shu-Osher 激波管算例，有限紧致格式结合不同识别方法，密度曲线， $t = 1.8$

Figure 3.4 Density, Shu-Osher,  $t = 1.8$

- 二维黎曼问题算例 二维黎曼问题常用来验证数值格式，本文采用的初始条件为 [71]

$$(\rho, u, v, p) = \begin{cases} (1.5, 0, 0, 1.5) & \text{if } 0.8 \leq x \leq 1, 0.8 \leq y \leq 1, \\ (0.5323, 1.206, 0, 0.3) & \text{if } 0 \leq x < 0.8, 0.8 \leq y \leq 1, \\ (0.138, 1.2606, 1.2606, 0.019) & \text{if } 0 \leq x < 0.8, 0 \leq y < 0.8, \\ (0.5323, 0, 1.206, 0.3) & \text{if } 0.8 < x \leq 1, 0 \leq y < 0.8. \end{cases}$$

计算时间为  $t = 0.8$ ，图 3.6 给出有限紧致格式结合不同识别方法的计算结果和局部放大图。计算网格为  $400 \times 400$ 。利用 WENO 格式在  $400 \times 400$  和加密的  $800 \times 800$  网格下的结果来做对比。可以看到，采用了 SZ 识别方法可以获得更多的小尺度结构；TVB 识别方法的结果也较 WENO-Z 要好；而使用了 KXRCF 和 BDF 识别方法，计算结果较 WENO-Z 并没有太大的改善；使用了 ATV 和 XS 识别方法的结果由于振荡，甚至比采用 WENO-Z 格式效果更差。

## 2. 双马赫反射问题

双马赫反射问题是另外一个经常用来验证数值方法的二维算例 [239]，在该问题中，一道和壁面有一定夹角的强激波从水平方向扫过壁面。计算区域采用  $[0, 4] \times [0, 1]$

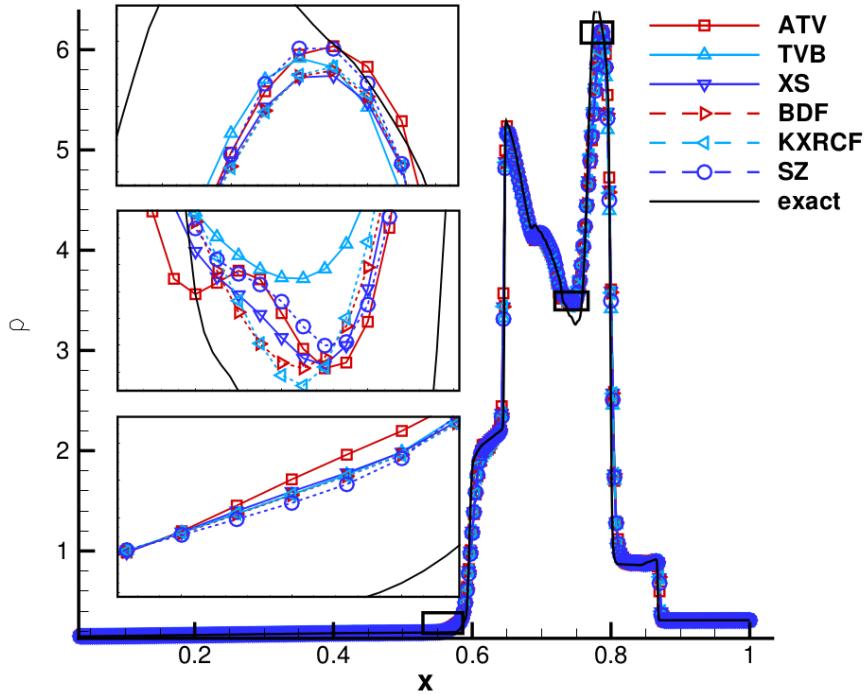


图 3.5 爆炸波相互作用算例，有限紧致格式结合不同间断识别方法，密度曲线， $t = 0.038$

Figure 3.5 Density, interacting of blast waves,  $t = 0.038$

的矩形区域，下边界  $\frac{1}{6} \leq x \leq 6$  采用壁面反射条件，初始时，一道马赫数为 10 的激波和水平成  $60^\circ$  夹角，激波在壁面的位置为  $x = \frac{1}{6}$ 。在  $0 < x < \frac{1}{6}$  区域采用准确的激波后条件。上边界通过马赫数为 10 的激波条件实时计算得到。左右边界分别采用入流和出流条件。波前条件为  $\rho = 1.4$ ,  $p = 1$ 。计算时间为  $t = 0.2$ ，该算例中我们只采用了上面算例中无振荡的四中激波识别方法。图 3.7 给出了密度分布及放大图。从中可以看到 SZ 识别方法具有最好的表现。

### 3.4 小结

本章中，我们将一些常用的间断识别方法加入有限紧致格式中，通过一系列的数值算例，对它们的表现进行了比较。数值结果表明基于  $\tau_5$  参数的 SZ 识别方法最为准确有效。当然，其它的一些识别方法，如 TVB、KXRCF 和 BDF，都能保证格式无振荡的性质，但是并不能在每个算例中都有足够精确的表现。由于 SZ 识别方法的有效性，我们可以进一步将它结合进其它杂交格式中，或将采用了 SZ 识别方法的有限紧致格式应用在更复杂流场问题求解中，如应用在下一章中的理想磁流体方程中。

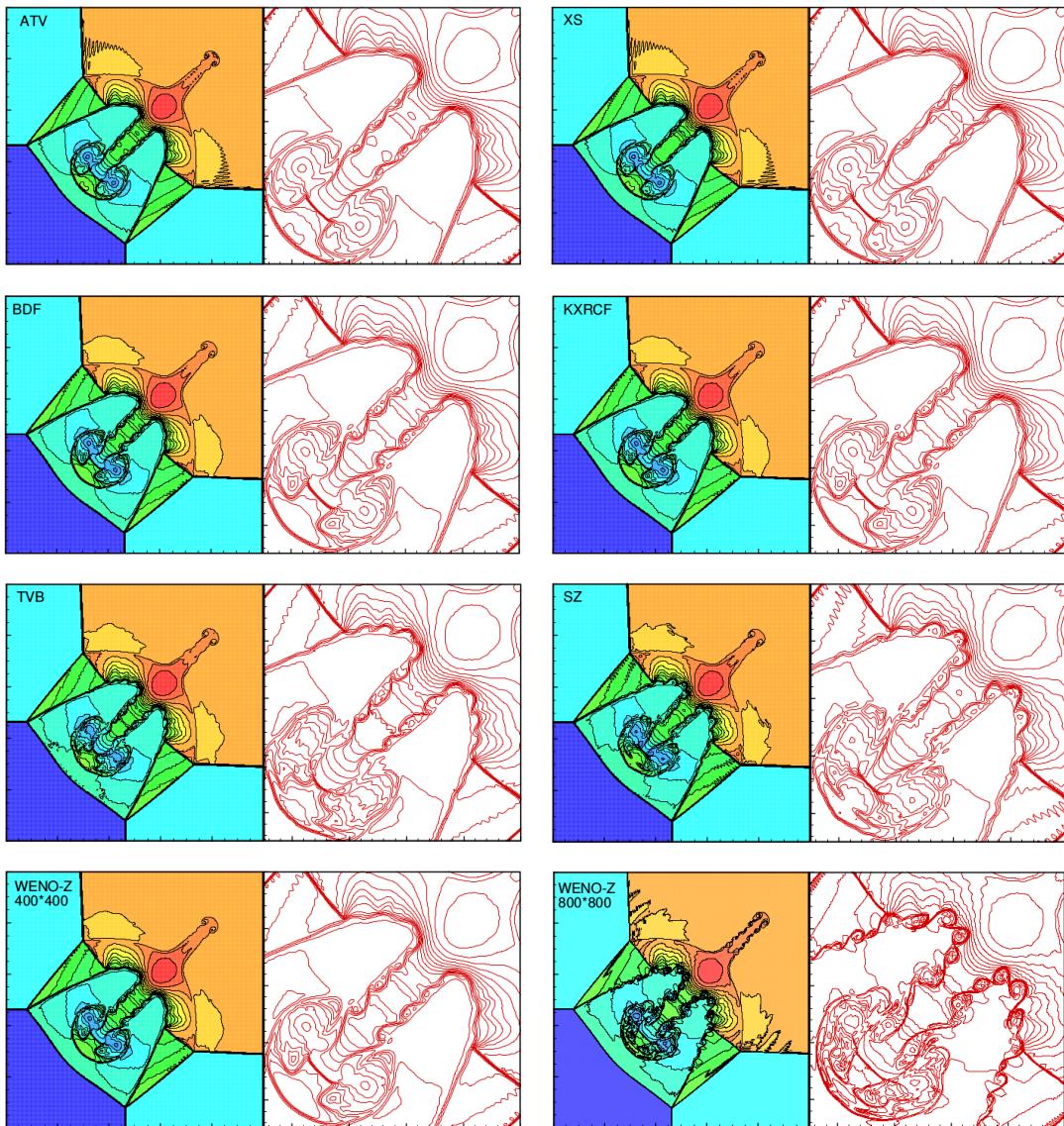


图 3.6 二维黎曼问题，采用不同识别方法计算结果，密度等值线图， $t = 0.8$

Figure 3.6 The density contours, 2D Remainn problem,  $t = 0.8$

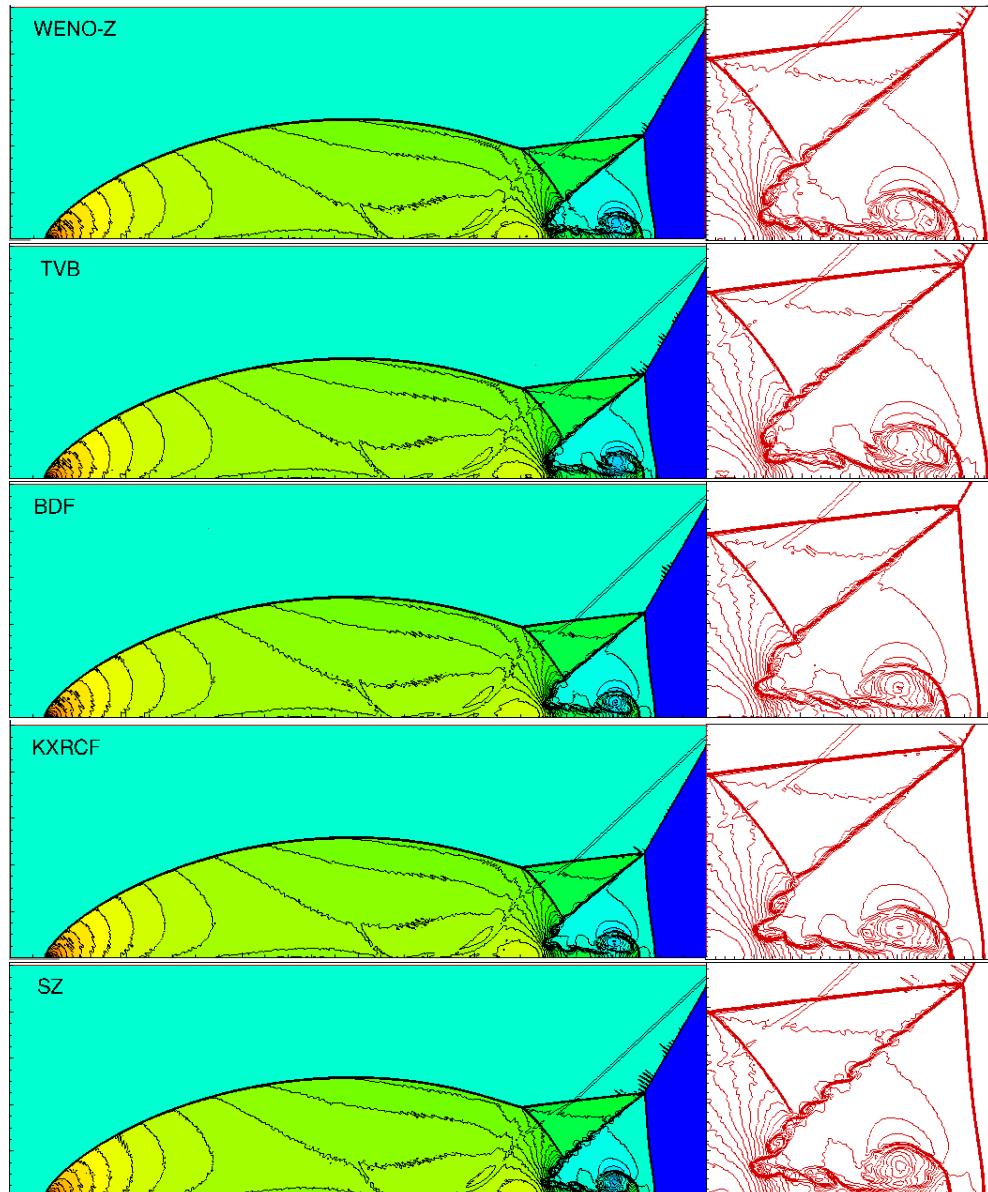


图 3.7 双马赫反射问题，采用不同识别方法的计算结果，密度等值线图， $t = 0.2$

Figure 3.7 The density contours, double Mach reflections,  $t = 0.2$

## 第四章 有限紧致格式在理想磁流体中的应用

如前文小节 1.1.2 中所述，理想磁流体（MHD）方程尽管是模拟磁流体的最简单自恰系统，但是由于电磁场和流场的耦合作用，仍然较 Euler 方程更为复杂，包括更多的波速、更庞大的特征值系统、非严格双曲特性和更丰富的流场结构等。

由于 MHD 特征系统的复杂性，发展适合 MHD 方程的近似黎曼求解器是一项困难的工作。在 MHD 求解的早期工作中，很多常见的通量差分分裂方法都被发展到 MHD 求解中，如 Roe 求解器 [41, 240, 241]、HLL 求解器 [242] 和 HLLC 求解器 [243–245] 等。由于 MHD 方程对于特征变量并不是一次齐次的，因此不能直接采用流通矢量方法，MacCormack 通过引入额外变量  $\tilde{a}$  [246, 247] 将 [248] 中的方法推广到 MHD 求解中。然而，由于流通矢量分裂方法基于特征值和特征向量运算，在 MHD 方程中，该类方法会异常繁琐。

近些年，对流迎风分离压力（convection upwind splitting pressure/CUSP）类方法在流体力学求解中取得巨大成功，如章节 1.3.2.2 中所介绍的，包括 Liou 等人提出的 AUSM 系列格式 [126, 127, 129, 249, 250]、Van Leer Hänel 格式 [251] 和 Edwards 等人提出的 LDFSS 格式 [252] 等。这些格式都属于 H-CUSP 类格式。然而，总焓  $H$  并不能沿传播方向保持守恒，而总能  $E$  却是守恒的 [133, 253]，据此，Zha 等人提出在对流项使用总能的 E-CUSP 格式 [133, 134, 254–256]，在流体力学方程求解中取得了很好的结果。

Agarwal 等人 [257] 首先将 AUSM 格式应用在一维 MHD 方程求解中，Han 等人随后 [258] 发展了一套求解 MHD 方程的 AUSMPW+/M-AUSMPW+ 格式。2012 年，Shen 等人 [259] 等人将更为稳定的 E-CUSP 格式发展到 MHD 求解中，认为该格式可以很好的求解 MHD 中的复杂的波动特性。

另一方面，在空间离散格式方面，由于理想磁流体方程和 Euler 方程的相似性，很多的流体力学高精度的数值方法都被推广到 MHD 方程求解中。如 Yee 等人提出了高精度低耗散滤波格式 [260]。Balbas [261] 发展了求解一维和二维 MHD 方程的高分辨率、无振荡中心格式。Gaitonde [262] 将紧致差分格式和滤波器结合，应用于三维理想磁流体方程求解中。考虑到中心格式和紧致格式在求解激波时的难点，Shen 等人 [259] 将高精度 WENO 格式推广在 MHD 方程求解中。然而，如第三章中所述，WENO 格式尽管具有高精度和稳定捕捉激波的优点，但是相比中心格式和紧致格式而言，对于高频短波的分辨能力较差。对于这一不足，采用杂交格式是一个较好的解决思路（前言 1.3.2.1 和第三章中），由于结合了线性格式的高精度、低耗散特性和激波捕捉格式的稳定性，杂交格式理论上应该更适合 MHD 方程的求解。

本章推广发展了求解理想磁流体方程的 E-CUSP 与有限紧致格式相结合的数值方法，并通过数值算例验证了该求解方法的鲁棒性和准确性。

## 4.1 数值方法

本章的主要内容是推广 E-CUSP 格式及有限紧致格式以用于理想磁流体方程的求解，为了完整性，下面主要给出 MHD 方程的 E-CUSP 形式以及保证磁场满足散度为零限制条件的求解方法。

### 4.1.1 E-CUSP 近似黎曼求解器 [259]

由于近似黎曼求解器的构造都是针对于一维问题，因此在高维问题的求解中，需要在各个空间维度分别采用近似黎曼求解器。为了简洁，对于控制方程 (1.3)，这里仅以  $x$  方向的  $\mathbf{F}$  通量为例介绍 E-CUSP 格式的构造过程。

E-CUSP 格式的构造基于特征分析 [133, 134, 254]，基本思想是将通量  $\mathbf{F}$  分裂分对流通量  $\mathbf{F}^C$  和压力通量  $\mathbf{F}^P$ ，

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^C + \mathbf{F}^P = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 \\ \rho uv \\ \rho uw \\ uE \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ p \\ 0 \\ 0 \\ pu \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

通量  $\mathbf{F}^C$  特征值为  $(u, u, u, u, u)$ ，代表对流过程，通量  $\mathbf{F}^P$  特征值为  $(0, 0, 0, -a, a)$ ，代表向各个方向传播的声波，根据它们的不同特征，Zha 等人 [133, 134, 254] 认为对流项  $\mathbf{F}^C$  应遵从迎风性质，压力项  $\mathbf{F}^P$  应采用上、下游加权平均的形式，权重为  $u \pm a$ 。

理想磁流体的特征系统含有三个不同的特征波速—快波  $c_f$ 、慢波  $c_s$  和中速 Alfvén 波，异常复杂，目前尚没有和流体力学方程  $\mathbf{F}^P$  项对应的精确的通量公式 [259]。然而由于磁流体方程具有和流体力学方程相似的波动特性，E-CUSP 的基本思想也可以推广到求解 MHD 方程中来。

在  $x$  方向，通量  $\mathbf{F}$  可以分解为

$$\mathbf{F} = \mathbf{f}u + \mathbf{P} + \psi u \quad (4.2)$$

其中

$$\mathbf{f} = \begin{Bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ E \\ B_x \\ B_y \\ B_z \end{Bmatrix}, \mathbf{P} = \begin{Bmatrix} 0 \\ p_t - B_x^2 \\ -B_y B_x \\ -B_z B_x \\ -B_x(uB_x + vB_y + wB_z) \\ -uB_x \\ -vB_x \\ -wB_x \end{Bmatrix}, \boldsymbol{\psi} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ p_t \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix}$$

和 E-CUSP 格式中将  $\rho u$  从焓项  $\rho Hu$  中分裂出来类似， $p_t u$  也被分裂出来。

方程 (1.3) 的空间半离散形式为

$$\frac{d\mathbf{U}}{dt} + \frac{\mathbf{F}_{i+1/2,j,k} - \mathbf{F}_{i-1/2,j,k}}{\Delta x} + \frac{\mathbf{G}_{i,j+1/2} - \mathbf{G}_{i,j-1/2,k}}{\Delta y} + \frac{\mathbf{H}_{i,j,k+1/2} - \mathbf{H}_{i,j,k-1/2}}{\Delta z} = 0 \quad (4.3)$$

根据 [256] 中的 E-CUSP 构造形式，可以给出  $x$  方向数值通量为：

$$\mathbf{F}_{1/2} = a_{1/2}[C^+ \mathbf{f}_L + C^- \mathbf{f}_R] + [D_L^+ \mathbf{P}_L + D_R^- \mathbf{P}_R] + \boldsymbol{\psi}_{1/2} \quad (4.4)$$

其中

$$\begin{aligned} M_{L,R} &= \frac{u_{L,R}}{a_{1/2}}, \\ C^+ &= \alpha_L^+(1 + \beta_L)M_L - \frac{1}{4}\beta_L(M_L + 1)^2 \\ C^- &= \alpha_R^-(1 + \beta_L)M_L + \frac{1}{4}\beta_L(M_L - 1)^2 \\ \alpha_{L,R}^\pm &= \frac{1}{2}[1 \pm \text{sign}(M_{L,R})] \\ \beta_{L,R} &= -\max[0, 1 - \text{int}(|M_{L,R}|)] \\ D_{L,R}^\pm &= \alpha_{L,R}^\pm(1 + \beta_{L,R}) - \frac{1}{2}\beta_{L,R}(1 \pm M_{L,R}) \\ \boldsymbol{\psi}_{1/2} &= a_{1/2}(C^+ + C^-)(D^+ \boldsymbol{\psi}_L + D^- \boldsymbol{\psi}_R) \end{aligned} \quad (4.5)$$

在文章 [258] 中，马赫数是通过快波波速来定义的  $M = \frac{u}{c_f}$ ，意味着  $M_{L,R}$  可以定义为  $M_{L,R} = \frac{u_{L,R}}{c_{f_{1/2}}}$ 。然而，公式 (4.2) 中的压力项不再是由单个波速决定的，如何计算相对马赫数  $M_{L,R}$  仍然是个待解决的问题。Shang [263] 指出在高频和低频波，快波波速和声波相同，但是对于中频波，快波波速明显要高于声波波速。在 [259] 中，采用的是声波和

快波波速平均的形式

$$M_{L,R} = \frac{u_{L,R}}{a_{1/2}} \quad (4.6)$$

其中，

$$a_{1/2} = \frac{1}{2}(C_{fL} + C_L + C_{fR} + C_R)$$

这种平均方式可以保证方法具有更好的稳定性。

由于有限紧致格式既能无振荡捕捉激波，在光滑区域有具有相应紧致格式的谱分辨率特性，因此本文利用有限紧致格式对  $\mathbf{f}$  进行重构。另外对半离散方程 (4.3) 的时间积分采用了三阶 TVD Runge-Kutta 方法。

#### 4.1.2 限制输运 (Constrained Transport/CT) 方法 [264]

数值模拟 MHD 方程时，需要满足磁场散度为零的限制条件， $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ 。为了满足这一条件，Powell 等人通过在原方程中添加一个和  $\nabla \cdot \mathbf{B}$  成正比的源项，得到新的特征系统。但是，新的系统会存在一些不确定性 [265]；投影方法 [266] 通过求解泊松方程和限制边界条件来满足磁场散度为零条件；Balsara 和 Spicer [264] 提出的限制输运方法是另外一种可以将散度误差控制在机器误差精度的方法。Toth [267] 认为限制输运方法是他所有测试过的方法中最准确的。因此本文采用限制输运方法。

首先，给出法拉第方程

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \times \mathbf{E} = 0 \quad (4.7)$$

对于理想磁流体电场  $\mathbf{E}$  为

$$\mathbf{E} = -\mathbf{V} \times \mathbf{B} \quad (4.8)$$

在限制输运方法中，磁场强度  $\mathbf{B}$  沿区域边缘取平均值  $\bar{\mathbf{B}}$ 。针对于三维方程，(4.7) 的半离散形式为：

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \bar{B}_{x_{i-1/2}, j, k} &= -\frac{E_{z_{i-1/2}, j+1/2, k} - E_{z_{i-1/2}, j-1/2, k}}{\delta y} + \frac{E_{z_{i-1/2}, j, k+1/2} - E_{z_{i-1/2}, j, k-1/2}}{\delta z} \\ \frac{d}{dt} \bar{B}_{x_i, j, k-1/2} &= -\frac{E_{z_{i+1/2}, j, k-1/2} - E_{z_{i-1/2}, j-1/2, k}}{\delta x} + \frac{E_{z_{i-1/2}, j, k+1/2} - E_{z_{i-1/2}, j, k-1/2}}{\delta y} \\ \frac{d}{dt} \bar{B}_{x_i, j-1/2, k} &= -\frac{E_{z_{i+1/2}, j-1/2, k} - E_{z_{i-1/2}, j-1/2, k}}{\delta x} + \frac{E_{z_{i, j-1/2, k+1/2}} - E_{z_{i, j-1/2, k-1/2}}}{\delta z} \end{aligned} \quad (4.9)$$

其中,

$$\begin{aligned} E_{x_{i,j+1/2,k+1/2}} &= \frac{1}{4}(H_{7i,j,k+1/2} + H_{7i,j+1,k+1/2} - G_{8i,j+1/2,k} - G_{8i,j+1/2,k+1}) \\ E_{y_{i+1/2,j,k+1/2}} &= \frac{1}{4}(F_{8i+1/2,j,k} + F_{8i+1/2,j,k+1} - H_{6i,j,k+1/2} - H_{6i+1,j,k+1/2}) \\ E_{z_{i+1/2,j+1/2,k}} &= \frac{1}{4}(G_{6i,j+1/2,k} + G_{6i+1,j+1/2,k} - F_{7i+1/2,j,k} - F_{7i+1/2,j+1,k}) \end{aligned}$$

$F_n, G_n, H_n$  ( $n = 6, 7, 8$ ) 是方程 (1.3) 的三个空间维度通量的第  $n$  个分量。

二维情况下, 通量可简化为:

$$\begin{aligned} E_{x_{i,j+1/2}} &= -G_{8i,j+1/2} \\ E_{y_{i+1/2,j}} &= F_{8i+1/2,j} \\ E_{z_{i+1/2,j+1/2}} &= \frac{1}{4}(G_{6i,j+1/2} + G_{6i+1,j+1/2} - F_{7i+1/2,j} - F_{7i+1/2,j+1}) \end{aligned}$$

由于  $\bar{\mathbf{B}}$  是  $\mathbf{B}$  在计算区域的平均值, 因此需要对能量进行如下修正:

$$E = E + \frac{1}{2}((\bar{\mathbf{B}}^{n+1})^2 - (\mathbf{B}^{n+1})^2) \quad (4.10)$$

## 4.2 数值算例

### 4.2.1 二维旋转偏振 Alfvén 波 [267]

该算例是一个存在理论解的光滑算例, Alfvén 波延与  $x$  轴成  $\alpha = 30^\circ$  角传播, 波长为 1。计算区域为  $x \in [0, 1/\cos\alpha]$ ,  $y \in [0, 1/\sin\alpha]$ 。初始条件为

$$\begin{aligned} \rho &= 1, \quad p = 0.1 \\ v_{\parallel} &= 0, \quad B_{\parallel} = 1 \\ v_{\perp} &= B_{\perp} = 0.1\sin[2\pi(x\cos\alpha + y\sin\alpha)] \\ w &= B_z = 0.1\cos[2\pi(x\cos\alpha + y\sin\alpha)] \end{aligned}$$

其中  $B_{\perp} = B_y\cos\alpha - B_x\sin\alpha$ ,  $B_{\parallel} = B_x\cos\alpha + B_y\sin\alpha$ ,  $\gamma = 5/3$ 。

表 4.1 给出  $t = 5$  时刻,  $B_{\perp}$  的  $L_1$  和  $L_{\infty}$  误差, 可以看到, 采用了有限紧致格式的计算结果和 WENO-Z 格式的计算结果相比, 误差均小了一个量级左右, 其中  $L_{\infty}$  精度接近六阶。因此, 有限紧致格式对于提高 MHD 算例光滑区域精度是极为有效的。

### 4.2.2 Orzag-Tang MHD 湍流问题

由于 Orzag-Tang 湍流问题 [268] 具有 MHD 湍流的诸多重要特点, 如复杂的涡结构和激波间相互作用, 该问题已成为验证 MHD 数值方法的一个标准算例 [258, 261, 264, 269]。

表 4.1 Alfvén 波算例, 不同格式精度对比,  $t = 5$ Table 4.1 Comparison of accuracy, Alfvé wave,  $t = 5$ 

Scheme	$N_x \times N_y$	$L_1$ error	$L_1$ order	$L_\infty$ error	$L_\infty$ order
WENO-Z	$8 \times 8$	3.01E-2	—	1.99E-2	—
	$16 \times 16$	8.93E-4	5.07	6.37E-4	4.97
	$32 \times 32$	2.38E-5	5.23	1.68E-5	5.25
	$64 \times 64$	7.62E-7	4.96	4.99E-7	5.07
FC	$8 \times 8$	7.27E-3	—	3.26E-3	—
	$16 \times 16$	2.40E-4	4.92	6.76E-5	5.59
	$32 \times 32$	2.39E-6	6.65	7.86E-7	6.42
	$64 \times 64$	7.54E-8	4.98	1.64E-8	5.58

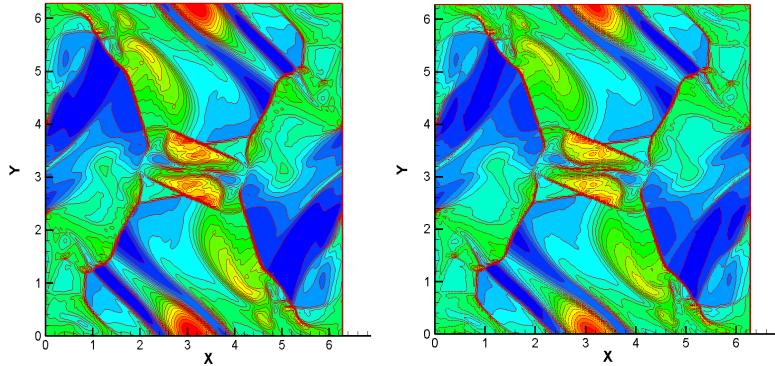


图 4.1 Orzag-Tang 湍流算例, 不同格式计算结果, 密度等值线

Figure 4.1 The density contours, Orzag-Tang turbulence problem

该问题初始条件为:

$$\begin{aligned} \rho(x, y) &= \gamma^2, & u(x, y) &= -\sin(y), & v(x, y) &= \sin(x), \\ p(x, y) &= \gamma, & B_x &= -\sin(y), & B_y(x, y) &= \sin(2x) \end{aligned}$$

其中  $\gamma = 5/3$ , 计算区域为  $[0, 2\pi] \times [0, 2\pi]$ 。计算时间为  $t = 3.0$ , 边界均采用周期边界条件。计算统一采用  $192 \times 192$  的网格, 图 4.1 给出 WENO-Z 格式和有限紧致 FC 格式密度等值线, 图中可以看出, 不论采用 WENO-Z 格式还是有限紧致格式都能稳定的计算流场, 捕捉流场中复杂的激波间相互作用。图 4.2 给出直线  $x = \pi$  上的数据对比图, 可以看到新的格式可以得到更高的波峰和更低的波谷, 代表着新的格式具有更低的耗散。

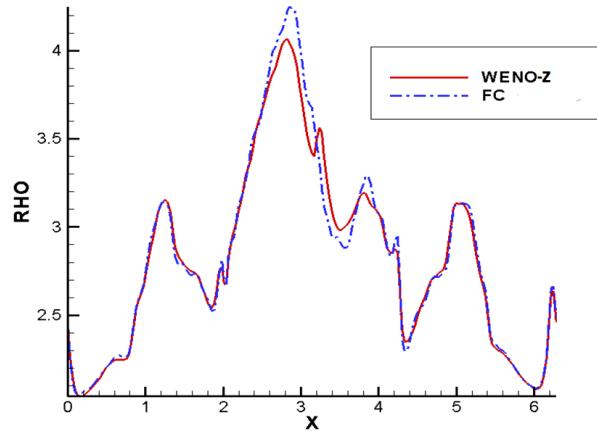


图 4.2 Orzag-Tang 湍流算例，不同格式在直线  $y = 1$  上的计算结果，密度

**Figure 4.2 Density distribution along the line  $y = 1.0$ , Orzag-Tang turbulence problem**

### 4.3 小结

本章中，我们将有限紧致格式推广到了 MHD 方程求解中，由于该格式结合了紧致格式的特性，因此具有较 WENO-Z 格式更低的耗散、更高的精度。通过和无需复杂的特征运算的 E-CUSP 分裂方法和保证磁场  $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$  的限制输运方法结合，有限紧致格式可以稳定、高精度的求解理想磁流体问题。新方法的有效性和鲁棒性得到了数值算例的验证。



## 第五章 双信息保存 (DIP) 方法

界面作为常见的物理现象，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很多方面的研究都有重要意义。

### 5.1 界面类型和界面方法

第一章 1.4.2 节中，简单的介绍了一些界面方法，忽略力学模型，界面的运动可以抽象为求解对流方程 [270,271]

$$\frac{\partial z}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla z = 0 \quad (5.1)$$

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  $\gamma$ 、密度  $\rho$  等。下面将分别对不同类型的界面进行分析。

#### 5.1.1 传统界面

尽管方程 (5.1) 是最简单的对流方程，然而，如果我们关注于界面的运动时，想要得到几何线（面）是异常困难的。以一维图 5.1 为例，如果直接对方程 (5.1) 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，大多数界面方法并不直接求解方程 (5.1) 本身，图 5.2 给出了不同界面方法的一维示意图。其中锋面追踪方法（图 5.2.a）直接追踪界面；MAC 方法（图 5.2.b）在界面一侧添加标记点；而 VOF 方法（图 5.2.c）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（图 5.2.d）求解方程 (5.1)，但是也并不直接求解间断函数  $z$  本身，而是求解到一个到界面的距离函数  $\phi$ （level set 函数），求解

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

如图 5.2.d 所示，level set 方法将  $\phi = 0$  的位置识别为界面位置。

从示意图 5.2 可以看出，这些界面方法明显可以分成两类 [140]，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。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 [159–161]，VOF-粒子方法等方法 [272]。

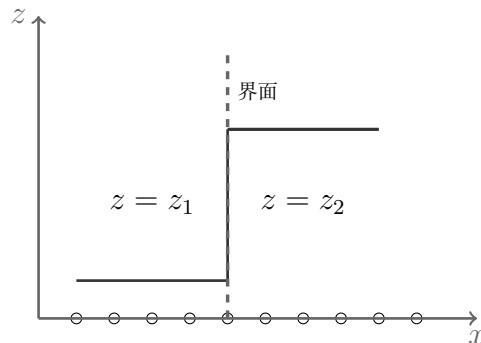


图 5.1 界面的一维示意图

Figure 5.1 The sketch of 1D interface

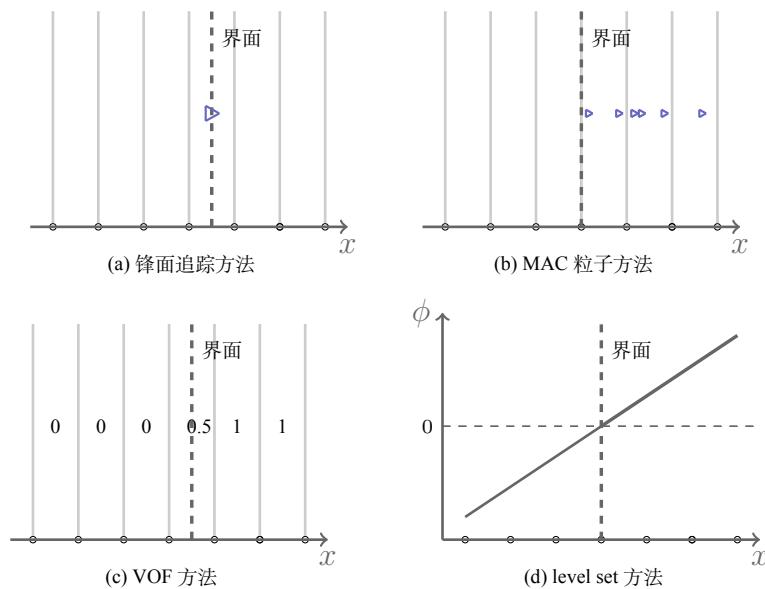


图 5.2 不同界面方法一维示意图

Figure 5.2 1D sketches of different interfacial methods

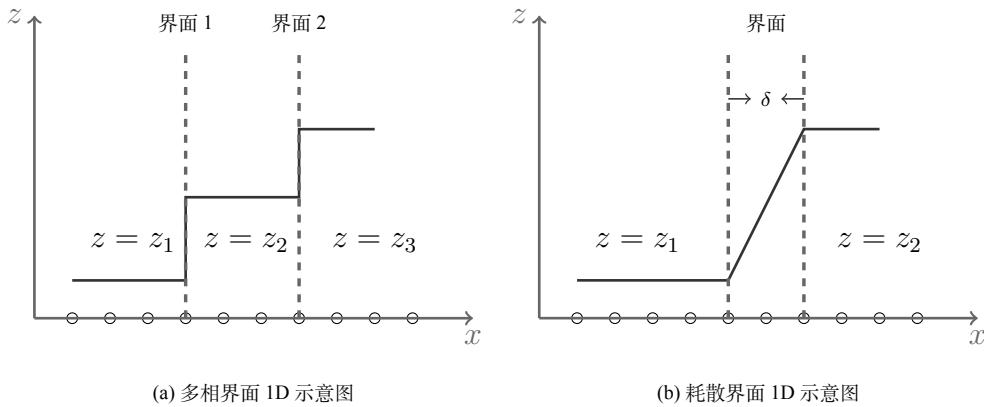


图 5.3 多相界面和耗散界面一维示意图

Figure 5.3 1D sketches of mutiphase interface and diffusive interface

### 5.1.2 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 [273]。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。

传统界面类方法由于都不是针对真实的物理量进行求解，如  $\gamma$  或  $\rho$  等，而只是从拓扑角度计算界面的运动，因此导致这些方法很难直接求解如图 5.3 所示的多相界面和具有界面厚度  $\delta$  的耗散界面。

## 5.2 双信息保存方法

本章中，我们构造一种新型的基于 Euler 网格的粒子方法，该方法具有全计算域覆盖的特点，并且针对方程 (5.1) 本身进行求解。在介绍该方法细节前，首先定义几个概念：

**信息点**: 携带有位置信息(包括所在单元和单元内相对坐标)和输运值  $z$  的 Lagrangian 粒子点。

**单元信息点 (单元点)** : 通过每一时间步的生成过程，控制在单元内运动的信息点。

**粒子信息点 (粒子点)** : 全域追踪的信息点。

由于新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。

### 5.2.1 单元点

通过在每一时间步的生成过程，保证每个单元含有唯一的单元点，即可以解决信息点分布问题，又可以用来传递单元上和粒子上的输运值  $z$ 。下面以一维为例来介绍单元点求解方程 (5.1) 的步骤。

#### 一. 初始化

如图 5.4 我们首先将  $[i - 1/2, i + 1/2]$  定义为第  $i$  单元。开始计算时，在每个单元中心引入一个单元点。单元点的位置可以根据其在单元内相对于中心的坐标  $X(i)$  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：

$$X(i) = 0, \bar{z}(i) = z(i) \quad (5.2)$$

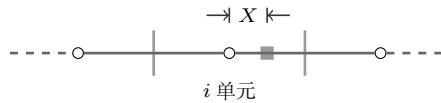


图 5.4 单元点一维示意图

Figure 5.4 1D sketch of cell-point

#### 二. 运动追踪

单元点的运动速度是由其相邻单元所在的速度场通过插值求得的。理论上可以构造任意高阶的速度插值，本文只采用线性插值，以  $i$  单元点为例，其所在位置速度插值为：

$$\bar{u}(i) = (1 - |X|)u(i) + |X|u(i + s_x) \quad (5.3)$$

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  $i$  单元点的位置和所在单元。单元点  $i$  经过  $\Delta t$  时间内运动到临时坐标为

$$L_x = X\bar{u} + \Delta t/\Delta x \quad (5.4)$$

通过临时坐标可以确定新的所在单元  $M$  为

$$M = i + \text{floor}(L_x + 0.5) \quad (5.5)$$

和新的相对坐标为

$$\bar{X} = L_x - \text{floor}(L + 0.5) \quad (5.6)$$

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，需要在每一时间步结束时对单元点进行更新，将含有多个单元点及不含单元点的单元进行处理。

如图 5.5 中所示的情形，即在  $i$  单元点上  $z = 1$ ,  $i+1$  单元点上  $z = 0$ ，导致离散求解中无法确定正确的分布。因此，需要根据所研究的问题分成无厚度界面和耗散界面进行处理。

#### 1). 无厚度界面

如果研究的是无厚度的传统界面或多相界面，规定界面位于  $z$  值最小的信息点位置，即图 5.5 中第二种情况。

如果一个单元内有多个信息点，如图 5.6，根据上面界面位置的规定，选择输运值  $z$  较小的单元点作为该单元的新单元信息点。

如果一个单元  $i$  内没有单元点，需要在单元中心引入新的单元点  $X(i) = 0$ ，单元点上对流信息  $z$  可以通过**反向速度法**得到。如图 5.9，反向速度法：当前单元中心点以当前速度的反向运动，经过  $\Delta t$  时间后到达的位置，其所在单元在上一时间步的输运值为当前中心点的输运值。结合公式 (5.5) 和 (5.6)，可知通过反向速度法定位的单元为：

$$M = i + \text{floor}(-u(i)\Delta t/\Delta x + 0.5)$$

#### 2). 耗散界面

如果研究的是耗散界面，则选择图 5.5 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 5.8 所示，如果单元内含有多个单元点，则采用所有单元点位置和输运值  $z$  的算术平均作为该单元内的信息点信息。

对于没有单元点的单元，可采用另外一种插值的方法生成单元点信息。如图 5.9 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邻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，即新的输运值为

$$\bar{z}_i = \frac{\omega_1 \bar{z}_{i-1} + \omega_2 \bar{z}_{i+1}}{\omega_1 + \omega_2} \quad (5.7)$$

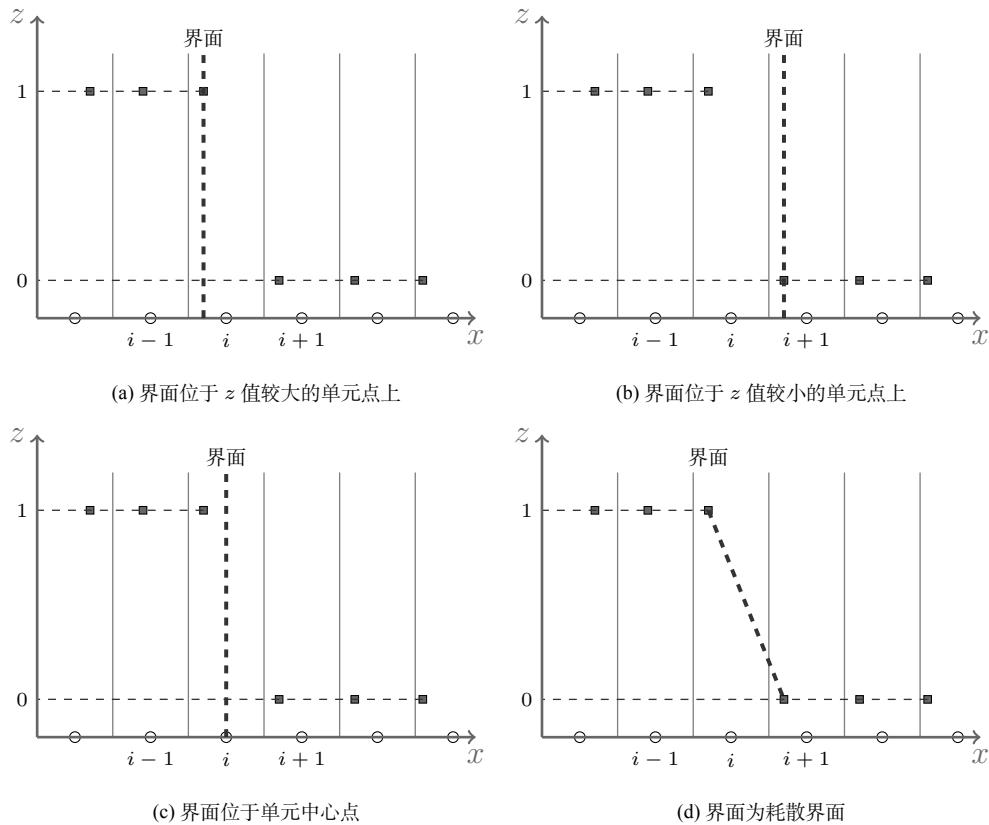


图 5.5 界面在单元点间可能的分布情况一维示意图

Figure 5.5 1D sketches of different interface cases between two cell-points

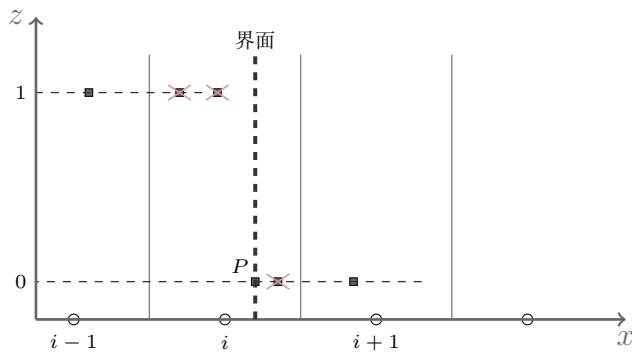


图 5.6 单元单元点生成方法，多个单元点，无厚度界面情况

Figure 5.6 1D sketch of the construction of cell-point, the cell with more than one cell-points, the transitional interface case

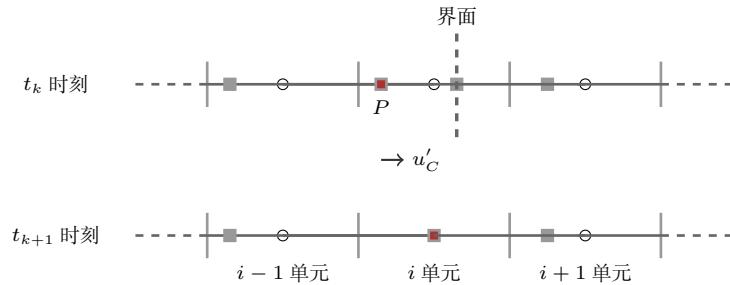


图 5.7 单元点的回溯生成法一维示意图

Figure 5.7 1D sketch of the backtracking method

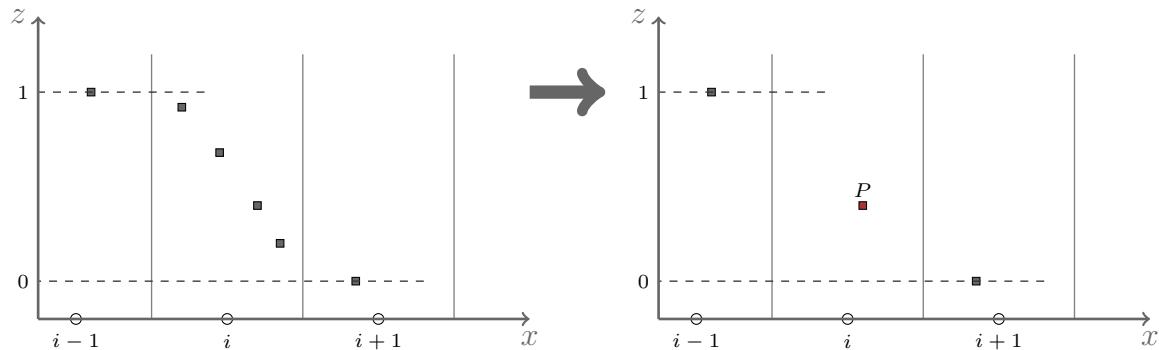


图 5.8 单元点生成方法，多个单元点，耗散界面情况

Figure 5.8 1D sketch of the construction of cell-point, the cell with more than one cell-points, the diffusive interface case

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。

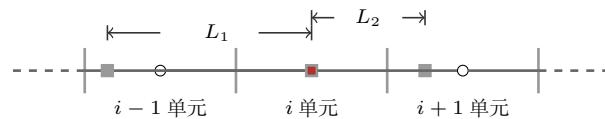


图 5.9 单元点生成方法，没有单元点，耗散界面情况

Figure 5.9 1D sketch of the construction of cell-point, the cell with no cell-point, the diffusive interface case

### 5.2.2 粒子信息点（粒子点）

上文中给出了无厚度界面和耗散界面两种情况利用单元点求解方程(5.1)的过程，单元点的求解方法弥补了传统方法中粒子不能全域覆盖、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完全的粒子方法，如 MAC 方法，那么准确。为了改进这一不足，我们利用粒子点对单元点进行修正。粒子点的计算过程和单元点相似。

#### 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

$$ip(i) = i, \quad X_p(i) = 0, \quad \bar{z}_p = z(i) \quad (5.8)$$

#### 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

$$\bar{u}_p = (1 - |X_p|)u(ip) + |X_p|u(ip + s_x) \quad (5.9)$$

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

$$L_x = X_p + u_p \Delta t / \Delta x \quad (5.10)$$

根据临时坐标可以得到新的单元位置和相对坐标：

$$ip = ip + \text{floor}(L_x + 0.5) \quad (5.11)$$

$$X_p = L_x - \text{floor}(L_x + 0.5) \quad (5.12)$$

#### 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。

### 5.2.3 边界处理

粒子方法的边界条件都很容易实现，下面分别介绍几种常用的边界条件。如图 5.10，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邻近网格的信息，因此在两端边界分别构造一个虚拟网格  $-1$  和  $Nx + 1$ 。



图 5.10 边界和虚拟网格一维示意图

Figure 5.10 1d sketch of the boundaries and ghost cells

#### 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

$$\begin{aligned} X(-1) &= X(Nx - 1), \quad X(Nx + 1) = X(1), \\ \bar{z}(-1) &= \bar{z}(Nx - 1), \quad \bar{z}(Nx + 1) = \bar{z}(1) \end{aligned} \quad (5.13)$$

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

$$\begin{aligned} ip(i) &= ip(i) - Nx, \quad \text{if } ip(i) > Nx \\ ip(i) &= ip(i) + Nx, \quad \text{if } ip(i) < 0 \end{aligned} \quad (5.14)$$

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，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。

$$X(-1) = 0, \quad \bar{z}(-1) = z_{\text{in}} \quad (5.15)$$

对于粒子点随着流体流入，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。

$$\begin{cases} N_p = N_p + 1 \\ ip(N_p) = 0 & \text{if } \text{Mrk}_p(0) = 0 \\ X_p(N_p) = 0 \\ \bar{z}_p(N_p) = z_{\text{in}} \end{cases} \quad (5.16)$$

其中  $\text{Mrk}_p$  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，对于单点，令虚拟单元  $Nx + 1$  中的单点始终放在单元中心，输运值为  $Nx$  单元点输运值，

$$X(Nx + 1) = 0, \quad \bar{z}(Nx + 1) = z(Nx) \quad (5.17)$$

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，将它去掉，并调整序号，

$$\begin{cases} ip(i) = ip(N_p) \\ X_p(i) = X_p(N_p) & \text{if } ip(i) > Nx \\ \bar{z}_p(i) = \bar{z}_p(N_p) \\ N_p = N_p - 1 \end{cases} \quad (5.18)$$

### 四. 固壁反射条件

假设图 5.5 中，左边为固壁，对于单点有边界条件

$$X(0) = 0, \quad X(-1) = -X(1), \quad \bar{z}(-1) = \bar{z}(1) \quad (5.19)$$

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，将它做反射，而输运值保持不变

$$\begin{cases} \text{tmp} = ip(i) + X_p \\ ip(i) = -\text{floor}(\text{tmp} + 0.5) & \text{if } \text{tmp} < 0 \\ X_p(i) = -(\text{tmp} + ip(i)) \end{cases} \quad (5.20)$$

### 5.2.4 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
     $\bar{z}(i) = z(i)$  ! 其中  $-0.5 < X(i) \leq 0.5$  为单元内坐标
ENDDO

```

```

! 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
    X_p(i) = 0 ! 其中 Np 为粒子点总数，会因为出流和入流变化
     $\bar{z}_p(i) = z(i)$ 
ENDDO

```

```

DO it = 1, NT ! 时间循环
    Mrk(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
    Mrk_p(i) = 0

```

##### 1. 单元点的运动追踪

```

DO i = -1, Nx + 1
     $s_x = \text{sign}(X(i))$ 
     $\bar{u}(i) = (1 - |X|)u(i) + |X|u(i + s_x)$  ! 速度插值
     $L_x = X(i) + \bar{u}(i)\Delta t / \Delta x,$ 
     $X(i) = L_x - \text{floor}(L_x + 0.5)$ 
     $M(i) = i + \text{floor}(L_x + 0.5)$  ! i 单元点移动到 M 单元

```

##### 2. 单元点的更新

```

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

```

$$X'(M) = (X(i) + \text{Mrk}(M)X'(M)) / (\text{Mrk}(M) + 1)$$

$$\bar{z}'(M) = (\bar{z}(i) + \text{Mrk}(M)\bar{z}'(M)) / (\text{Mrk}(M) + 1)$$

```
    Mrk(M) = Mrk(M) + 1
```

```
END DO
```

##### 3. 粒子点的运动追踪

```

DO i = 0, Np
     $s_x = \text{sign}(X_p(i))$ 
     $\bar{u}_p(i) = (1 - |X_p|)u(ip) + |X|u(ip + s_x)$  ! 速度插值

```

```

 $L_x = X_p(i) + \bar{u}_p(i)\Delta t/\Delta x$ 
 $X_p(i) = L_x - \text{floor}(L_x + 0.5)$  ! i 粒子点新位置
 $ip(i) = ip(i) + \text{floor}(L_x + 0.5)$ 

```

#### 4. 粒子点修正单元点

```

IF Mrkp(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
         $X'(ip) = X_p(i)$ 
         $\bar{z}'(ip) = \bar{z}_p(i)$  ! 多个粒子点, 选取 z 值小的点
    ENDIF
ENDIF
 $X'(ip) = (X_p(i) + \text{Mrk}_p(ip)X'_p(ip))/( \text{Mrk}_p(ip) + 1)$  ! 多个粒子点, 取平均
 $\bar{z}'(ip) = (\bar{z}_p(i) + \text{Mrk}_p(ip)\bar{z}'_p(ip))/( \text{Mrk}_p(ip) + 1)$ 
 $\text{Mrk}_p(ip) = \text{Mrk}_p(ip) + 1$ 
END DO

```

#### 5. 在空单元生成单元点

```

DO i = 0, Nx
    IF Mrk(i) + Mrkp(i) = 0 THEN
         $L_x = -u(i)\Delta t/\Delta x$ 
         $M = i + \text{floor}(L_x + 0.5)$  ! 回溯生成单元点
         $X'(i) = 0$ 
         $\bar{z}'(i) = \bar{z}(M)$ 
         $L_1 = |X'(i+1) + 1|$ 
         $L_2 = |X'(i-1) - 1|$ 
         $\bar{z}'(i) = (\bar{z}'(i+1)/L_1 + \bar{z}'(i-1)/L_2)/(1/L_1 + 1/L_2)$ 
    ENDIF
END DO
DO i = 0, Nx
     $\bar{z}(i) = \bar{z}'(i)$ 
     $X(i) = X'(i)$ 
     $z(i) = \bar{z}(i)$ 
END DO

```

### 5.2.5 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。下面简单的介绍下 DIP 方法求解二维方程 (5.21) 的实现过程，详细内容可见附录。

$$\frac{\partial z}{\partial t} + u \frac{\partial z}{\partial x} + v \frac{\partial z}{\partial y} = 0 \quad (5.21)$$

#### 5.2.5.1 单元点

##### 一. 初始化

初始化除了维度增加以外完全和一维相同：

$$X(i, j) = 0, \quad Y(i, j) = 0, \quad \bar{z}(i, j) = z(i, j) \quad (5.22)$$

## 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：

$$\begin{cases} \bar{u}(i, j) = (1 - |X|)u(i, j) + |X|u(i + s_x, j) \\ \bar{v}(i, j) = (1 - |Y|)v(i, j) + |Y|v(i, j + s_y) \end{cases} \quad (5.23)$$

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情形相同，其中耗散型界面的单元点生成仍采用邻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：

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

### 5.2.5.2 粒子点

通过一维 DIP 方法可以看出，除了初始化外，粒子点的标记和其所在位置并没有任何关系，因此为了简便粒子点仍然采用一维标记。

#### 一. 初始化

我们将初始化中第  $(i, j)$  单元内的粒子点标记为第  $n = i + j \cdot Nx$  个粒子点，其中  $i = 0, 1, \dots, Nx, j = 0, 1, \dots, Ny$ ，因此初始粒子点的总数为  $N_p = (Nx+1) \times (Ny+1)$ ，粒子点的初始化为

$$\begin{cases} X_p(n) = 0 \\ Y_p(n) = 0 \end{cases}, \quad \begin{cases} ip(n) = i \\ jp(n) = j \end{cases}, \quad \bar{z}_p(n) = z(i, j) \quad (5.24)$$

#### 二. 粒子点的运动追踪

首先通过一维线性插值的方式得到单元点速度：

$$\begin{cases} \bar{u}_p(n) = (1 - |X|)u(ip, jp) + |X|u(ip + s_x, jp) \\ \bar{v}_p(n) = (1 - |Y|)v(ip, jp) + |Y|v(ip, jp + s_y) \end{cases} \quad (5.25)$$

为了表达简单，在不引起混淆的情况下将  $X_p(n)$ 、 $Y_p(n)$ 、 $ip(n)$  和  $jp(n)$  简写为  $X_p$ 、 $Y_p$ 、 $ip$  和  $jp$ 。其中

$$\begin{cases} s_x = \text{sign}(X_p) \\ s_y = \text{sign}(Y_p) \end{cases}$$

临时坐标变化：

$$\begin{cases} L_x = X_p + \bar{u}_p(n)\Delta t/\Delta x \\ L_y = Y_p + \bar{v}_p(n)\Delta t/\Delta y \end{cases}$$

所在单元变化和相对坐标变化为

$$\begin{cases} ip(n) = ip(n) + \text{floor}(L_x + 0.5) \\ jp(n) = jp(n) + \text{floor}(L_y + 0.5) \\ X_p(n) = L_x - \text{floor}(L_x + 0.5) \\ Y_p(n) = L_y - \text{floor}(L_y + 0.5) \end{cases}$$

### 三. 粒子点修正单元点

粒子点修正单元点的过程和通过单元点更新单元点是相似的，只是将单元点换成粒子点。具体过程可以参见附录A 中的算法。

#### 5.2.5.3 二维边界处理

二维边界处理和一维是相似的，下面对入流和出流边界条件进行简单介绍。

##### 一. 入流边界条件

和一维相似，假设左侧边界为入流边界，对于单元点，令左侧虚拟单元  $(-1, j)$  中的单元点始终放在单元中心，输运值为入流值。

$$X(-1, j) = 0, \bar{z}(-1, j) = z_{\text{in}} \quad (5.26)$$

对于粒子点，随着流体的流入，在入流单元中添加新的粒子点，粒子点总数会出现浮动。

$$\begin{cases} N_p = N_p + 1 \\ ip(N_p) = 0 \\ jp(N_p) = j & \text{if } \text{Mrk}_p(0, j) = 0 \\ X_p(N_p) = 0 \\ Y_p(N_p) = 0 \\ \bar{z}_p(N_p) = z_{\text{in}} \end{cases} \quad (5.27)$$

其中  $j = 0, 1, \dots, Ny$ ,  $\text{Mrk}_p$  为单元中粒子点数目标记函数。

##### 二. 出流边界条件

假设右侧为出流条件，对于单元点，令虚拟单元  $(Nx + 1, j)$  中的单元点始终放在单元中心，输运值为  $(Nx, j)$  单元点输运值，

$$X(Nx + 1, j) = 0, Y(Nx + 1, j) = 0, \bar{z}(Nx + 1, j) = \bar{z}(Nx, j) \quad (5.28)$$

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

$$\begin{cases} ip(n) = ip(N_p) \\ jp(n) = jp(N_p) \\ X_p(n) = X_p(N_p) & \text{if } ip(n) > Nx \\ Y_p(n) = Y_p(N_p) \\ \bar{z}_p(n) = \bar{z}_p(N_p) \\ N_p = N_p - 1 \end{cases} \quad (5.29)$$

### 5.3 数值算例

下面我们将通过一维和二维算例验证新方法的有效性。

#### 5.3.1 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（包括粒子点和单元点）间的距离不会变化，所以不会有多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均匀速度场  $u = 1$ ，即方程

$$\frac{\partial z}{\partial t} + \frac{\partial z}{\partial x} = 0 \quad (5.30)$$

控制下的传播问题。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 5.11 给出 23 个时间步后单元点的分布情况（为了避免信息点和网格点重合，这里选择了一个特殊的时间步）。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。

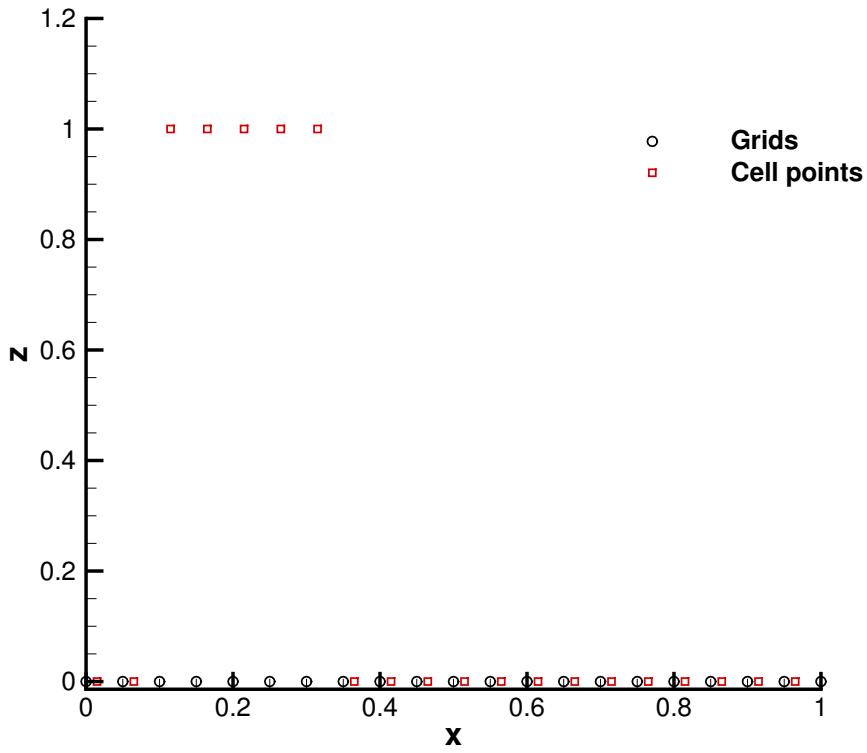


图 5.11 一维均匀速度场算例, 时间步  $Nt = 23$

Figure 5.11 Numerical results of a 1D uniform velocity field case,  $Nt = 23$

2). 复杂组合波的传播, 初始条件为

$$z_0(x) = \begin{cases} \frac{1}{6} (G(x, \beta, z-\delta) + G(x, \beta, z+\delta) + 4G(x, \beta, z)), & -0.8 \leq x \leq -0.6 \\ 1, & -0.4 \leq x \leq -0.2 \\ 1 - |10(x - 0.1)|, & 0 \leq x \leq 0.2 \\ \frac{1}{6} (F(x, \alpha, a-\delta) + F(x, \alpha, a+\delta) + 4F(x, \alpha, a)), & 0.4 \leq x \leq 0.6 \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (5.31)$$

其中函数  $G$  和  $F$  为

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

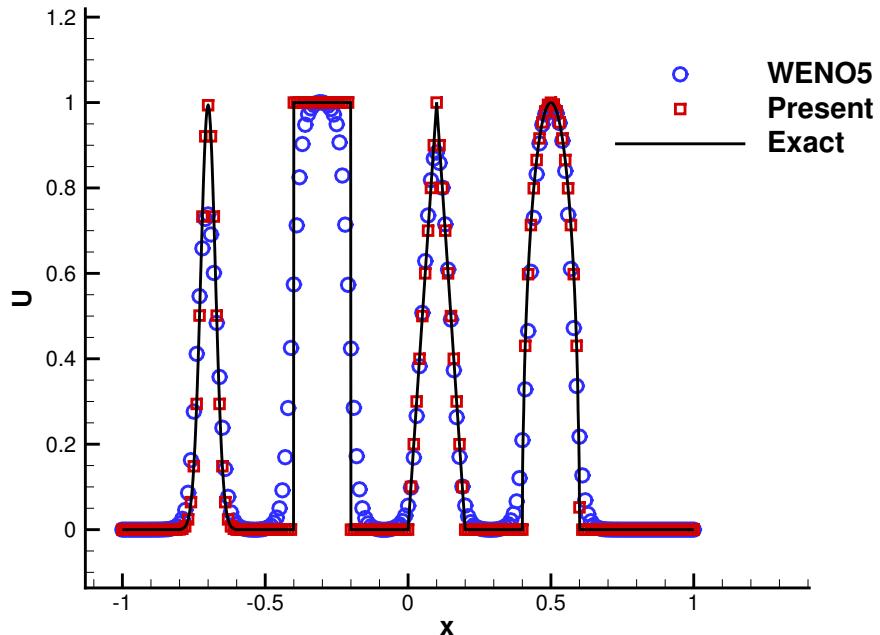


图 5.12 一维组合波的传播，不同计算方法计算结果比较， $t = 6$

Figure 5.12 Numerical result with the initial solution Equation (5.31),  $t = 6$

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

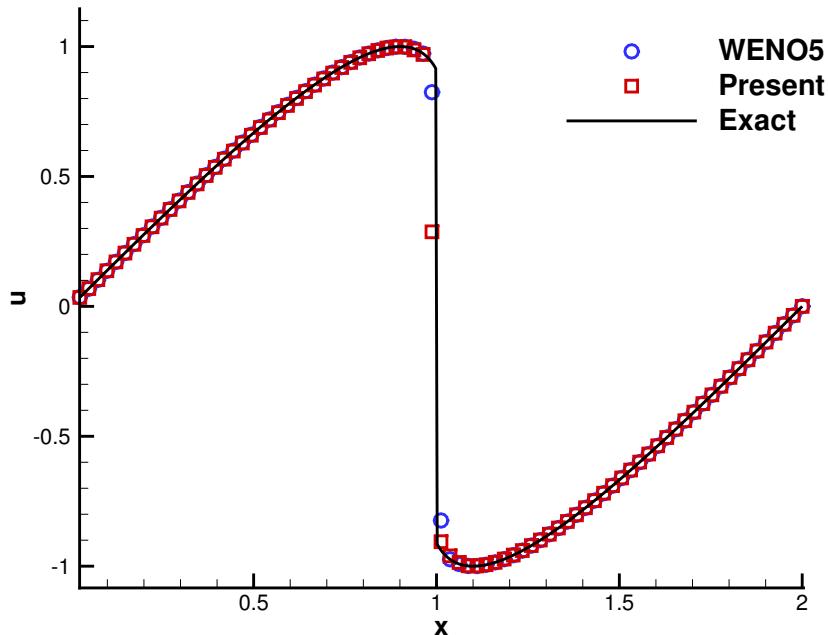
其中  $a = 0.5$ ,  $z = -0.7$ ,  $\delta = 0.05$  和  $\beta = \log 2 / 36\delta^2$ 。计算采用  $N = 200$  的网格，计算时间为  $t = 6$ 。我们将新方法的计算结果和采用了 WENO 格式的有限差分方法计算进行对比，从图 5.12 可以看出，对于该类线性问题，无论解中是否含有间断，DIP 方法都能准确的模拟。

## 2. 无粘 Burgers 方程问题

无粘 Burgers 方程为

$$\frac{\partial z}{\partial t} + z \frac{\partial z}{\partial x} = 0, \quad z_0(x) = \sin(\pi x), \quad 0 \leq x \leq 2 \quad (5.32)$$

由于速度场设定为  $u = z$ ，因此方程 (5.32) 是非线性方程。由于该方程的非线性特性，原本光滑的波形经过一段时间后会发展出间断。图 5.13 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，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

图 5.13 Burgers 方程算例,  $t = 0.4$ Figure 5.13 Numerical result of Burgers equaiton (5.32),  $t = 0.4$ 

可以模拟传统界面的生成过程。

### 5.3.2 二维数值算例

二维问题中存在复杂的拓扑变化，有很多测试界面方法的常见算例。

#### 1. 均匀速度场算例

该算例采用  $u = 1, v = 1$  的均匀速度场，即控制方程为

$$\frac{\partial z}{\partial t} + \frac{\partial z}{\partial x} + \frac{\partial z}{\partial y} = 0 \quad (5.33)$$

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  $20 \times 20$ ，计算时间为  $t = 0.6$ 。从图 5.14 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

Zalesak 的圆盘旋转算例 [87] 是一个验证界面方法的经典算例，采用旋转速度场

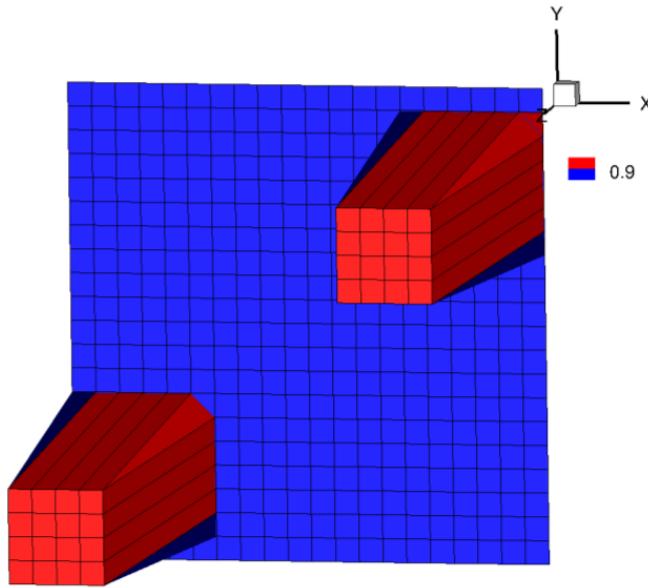
图 5.14 二维均匀速度场算例,  $t = 0.6$ 

Figure 5.14 Numerical results of a 2D uniform velocity field case,  $t = 0.6$

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

初始分布为

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

该问题中计算域为  $[0, 1] \times [0, 1]$ , 采用  $N = 200 \times 200$  网格。图 5.15 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，即便经过很长长时间的旋转，DIP 方法仍可以很好保持圆盘的形状。

### 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 [274, 275]，在计算开始，一个半径

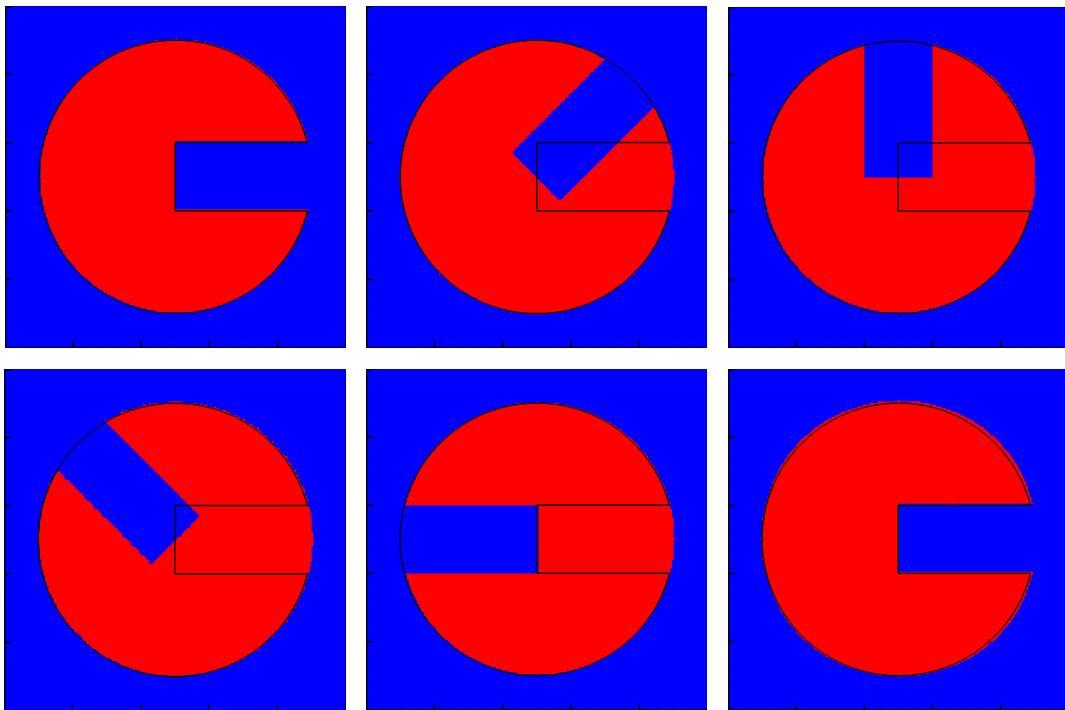


图 5.15 Zalesak 圆盘旋转算例,  $N = 200 \times 200$  网格下计算结果 ( $t_1 = 0, t_2 = 0.25, t_3 = 0.5, t_4 = 0.75, t_5 = 1$  和  $t_6 = 20$ ), 其中黑线为初始条件

Figure 5.15 Numerical results of the Zalesak disk problem,  $t_1 = 0, t_2 = 0.25, t_3 = 0.5, t_4 = 0.75, t_5 = 1$  and  $t_6 = 20$ ,  $N = 200 \times 200$

为 0.2 的圆, 圆心位于  $(0.5\pi, 0.7)$ ,

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

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准确性。

图 5.16 中给出了  $N = 200 \times 200$  网格下计算结果, 分别为  $T = \pi$  时的结果和继续反向运动  $\pi$  的结果,  $T = 2\pi$  的结果和继续反向运动  $2\pi$  的结果, 可以看到新方法可以很好的计算界面的拉伸变化, 并保持体积的守恒。

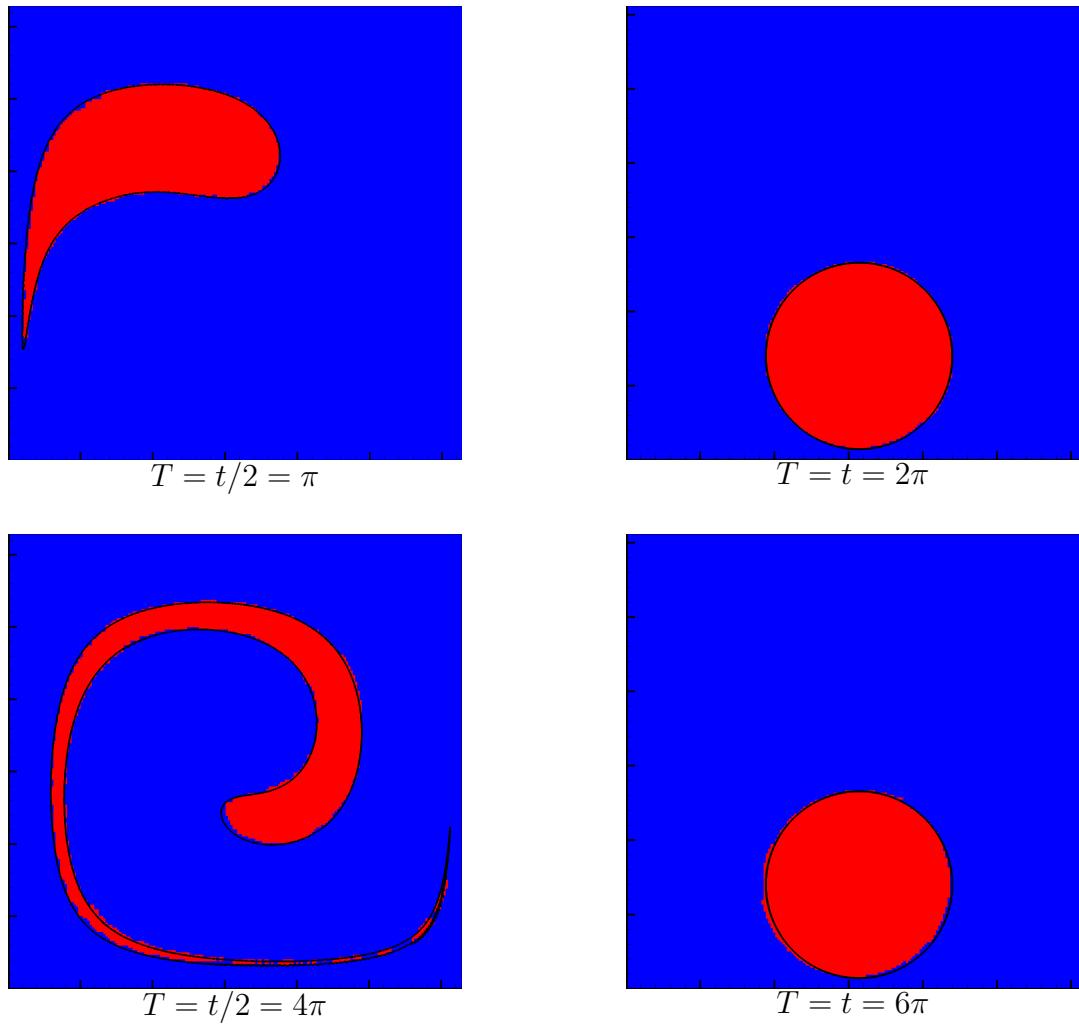


图 5.16 界面拉伸算例,  $N = 200 \times 200$ , 其中黑线为参考解

Figure 5.16 Numerical results of the interface stretching problem,  $N = 200 \times 200$

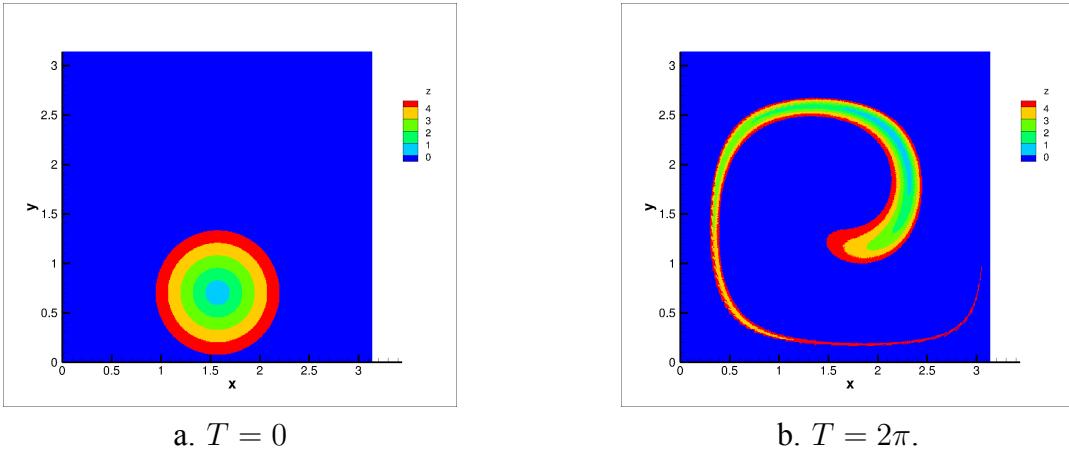


图 5.17 多相界面拉伸算例,  $N = 400 \times 400$

**Figure 5.17 Numerical results of the multiphase interface stretching problem,  $N = 400 \times 400$**

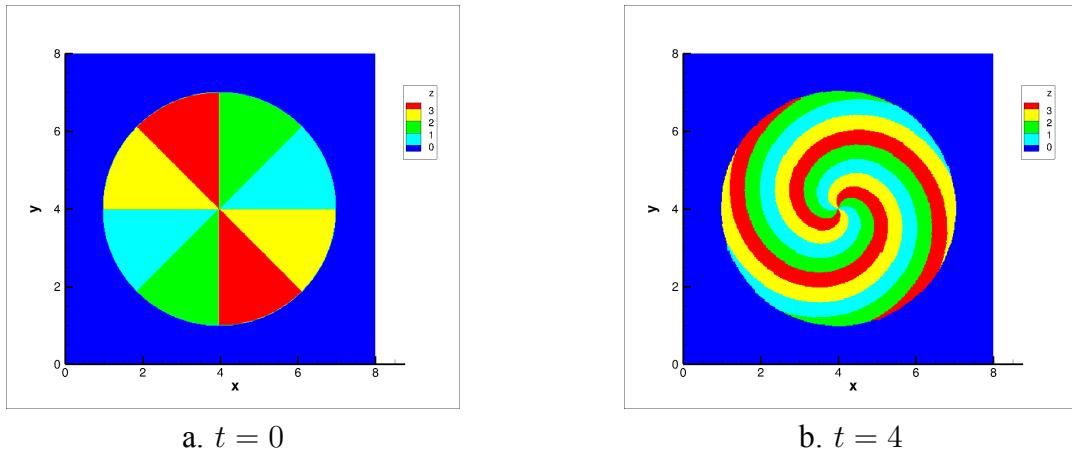
#### 4. 多相界面问题

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 5.17.a 所示, 图 5.17.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

图 5.18 多相界面旋转算例,  $N = 400 \times 400$ **Figure 5.18 Numerical results of multiphase interface rotation problem,  $N = 400 \times 400$** 

转问题, 计算域选取为  $[-2, 2] \times [-2, 2]$ , 初始条件为

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

速度场为

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

图 5.18.a 给出初始状态, 图 5.18.b 给出经过  $t = 4$  时间的结果, 从中可以看出, 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。

## 5.4 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 (单元点和粒子点), 单元点在单元内运动, 每一步都会重新生成用以保持信息点全域覆盖; 粒子点全域追踪,

用来修正单元点由于生成过程而产生的误差。由于针对于对流方程本身求解，该方法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。我们将在第七章进一步验证新方法在计算耗散界面时的性能。



## 第六章 刚性常微分方程和数值摄动（NP）方法

在采用分裂方法求解化学反应流动时，求解的反应常微分方程（ODE）通常具有较强的刚性。本章将结合数值摄动思想，发展刚性 ODE 方程的数值摄动方法，并为后文的刚性化学反应流动计算提供有效的数值方法。

### 6.1 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

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x), x(0) = x_0, (x \in \mathbb{R}^s, t \leq 0) \quad (6.1)$$

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 [195]。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 1958 年 Curtiss 和 Hirschfelder [276] 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，会比采用显示格式求解更具有优势的一类方程。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，而采用隐式格式求解非刚性 ODE 方程，其复杂的迭代同样会造成计算效率低下。如何能提高刚性方程求解效率，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 [195,277] 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难以界定。即便对于存在刚性的方程，采用隐式格式进行求解也不一定可以提高效率。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，刚性所在的区域相对计算区域而言很小，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，多数学者目前仍更愿意采用显式格式进行求解。

如前言中所讨论的，目前除隐式格式外，也有很少的一些显式格式具有一定的稳定性，例如，二阶线化梯形公式（LT）[197,198]，该格式在化学反应方程求解中得到较多的应用。然而，线化梯形公式仅仅具有二阶精度，在非刚性的区域精度不足，另外，该

方法也并非绝对稳定的，刚性过大仍然会出现计算问题。

因此，对于求解可能存在刚性的 ODE 方程（如化学反应方程），发展高精度的、刚性稳定且具有显形式的格式是一个重要的课题。基于数值摄动的思想 [199, 200, 227]，本章构造了针对于 ODE 方程 (6.1) 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有效性。

## 6.2 数值摄动 (NP) 方法

数值摄动方法是高智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 [278, 279] 和摄动有限体积方法 [280]。

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格式中各阶截断误差，由此获得高阶数值格式。

下面我们基于数值摄动的思想构造求解 ODE 方程 (6.1) 的数值摄动 (NP) 方法。

方程 (6.1) 的一阶显示欧拉格式表示为

$$x_{n+1} - x_n = \Delta t f(t, x_n) \quad (6.2)$$

对其泰勒展开，可以得到

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x) - \frac{1}{2} \Delta t \frac{d^2 x}{dt^2} - O(\Delta t^2) \quad (6.3)$$

与对流扩散方程的数值摄动方法 [199, 200] 类似，在方程 (6.2) 左侧引入一个摄动多项式  $p$ ，格式变为

$$p(x_{n+1} - x_n) = \Delta t f(t, x_n) \quad (6.4)$$

其中的摄动多项式  $p$  为

$$p = 1 + \sum_{i=1}^{\infty} a_i \Delta t^i \quad (6.5)$$

将 (6.5) 代入 (6.4) 并对其泰勒展开有

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x) - \left( \frac{1}{2} \frac{d^2 x}{dt^2} + a_1 \frac{dx}{dt} \right) \Delta t - \left( \frac{1}{6} \frac{d^3 x}{dt^3} + \frac{a_1}{2} \frac{d^2 x}{dt^2} + a_2 \frac{dx}{dt} \right) \Delta t^2 + O(\Delta t^4) \quad (6.6)$$

从中可以看出，如果方程右端第二项为零，即

$$\frac{1}{2} \frac{d^2x}{dt^2} + a_1 \frac{dx}{dt} = 0 \quad (6.7)$$

则格式 (6.4) 具有二阶精度。依此类推，我们可以通过消除右端更多项来构造更高阶格式。公式 (6.6) 中二阶导数，及其它高阶导数都可以直接通过原方程 (6.1) 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

$$a_1 = -\frac{f'}{2} \quad a_2 = \frac{1}{12} f'^2 - \frac{1}{6} f'' f \quad \dots \quad (6.8)$$

方程 (6.1) 的  $N$  阶数值摄动格式可以写为

$$x_{n+1} = x_n + \Delta x f(t, x_n) / p_N \quad (6.9)$$

其对应的摄动多项式可以记作

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

为了进一步提高三阶数值摄动 (3NP) 格式的稳定性，我们对三阶摄动多项式做一简单的变形：

$$\bar{p}_3 = \frac{1 + b_1 \Delta t + b_2 \Delta t^2}{1 - b_2 \Delta t} \quad (6.10)$$

为保证格式的精度，要求  $\bar{p}_3$  是  $p_3$  的二阶近似，因此可以求得

$$b_1 = a_1 - \frac{a_2}{a_1 + 1}, \quad b_2 = \frac{a_2}{a_1 + 1} \quad (6.11)$$

下节的分析表明，变形后的三阶 NP (3TNP) 格式同样具有三阶精度，且比 3NP 格式更稳定。

### 6.3 NP 格式的稳定性分析

针对方程

$$x' = qx, \operatorname{Re}(q) < 0 \quad (6.12)$$

采用某一方法对方程 (6.12) 离散后可以写为：

$$x_{n+1} = E(h)x_n \quad (6.13)$$

其中  $h = q\Delta t$ 。

为了分析方法的稳定性，文 [281] 引入了 A 稳定性和强 A 稳定性的概念：

**定义 1 (A 稳定).** 根据 Dahlquist [282] 的分析，关于离散方程 (6.13) 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  $\lim_{\operatorname{Re}(h) \rightarrow -\infty} |E(h)| = 0$ ，则认为该格式是强 A 稳定的。

为了对比分析，我们给出一阶显式欧拉格式 (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

$$x_{n+1} - x_n = \Delta t f(t, x_n) \quad (6.14)$$

$$E^{1\text{EE}}(h) = 1 + h \quad (6.15)$$

(2) 一阶隐式欧拉格式

$$x_{n+1} - x_n = \Delta t f(t, x_{n+1}) \quad (6.16)$$

$$E^{1\text{IE}}(h) = \frac{1}{1-h} \quad (6.17)$$

(3) 二阶线化梯形公式 [197, 198]

$$x_{n+1} - x_n = \frac{\Delta t f(t, x_n)}{1 - 1/2 \Delta t f'_x(t, x_n)} \quad (6.18)$$

$$E^{2\text{LIE}}(h) = \frac{1 + \frac{1}{2}h}{1 - \frac{1}{2}h} \quad (6.19)$$

(4) 三阶显式 Runge-Kutta 格式

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + \frac{1}{4}k_1 + \frac{3}{4}k_3 \\ k_1 &= \Delta t f(t_n, x_n) \\ k_2 &= \Delta t f(t_n + \frac{1}{3}\Delta t, x_n + \frac{1}{3}k_1) \\ k_3 &= \Delta t f(t_n + \frac{2}{3}\Delta t, x_n + \frac{2}{3}k_2) \end{aligned} \quad (6.20)$$

$$E^{3\text{RK}}(h) = 1 + h + \frac{1}{2}h^2 + \frac{1}{6}h^3 \quad (6.21)$$

(5) 数值摄动格式

对于方程 (6.12), 容易求得摄动系数为  $a_1 = -\frac{1}{2}q$ ,  $a_2 = \frac{1}{12}q^2, \dots$ . 因此几个 NP 格式的  $E(h)$  函数表示为

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

值得指出, 求解线性方程 (6.12) 时, 二阶线化梯形公式具有和二阶 NP 格式相同的形 式。

图 6.1 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 3TNP 格式较 3NP 格式具有更大的稳定区域，而其中只有 3TNP 格式和一阶隐式欧拉格式是强 A 稳定的。

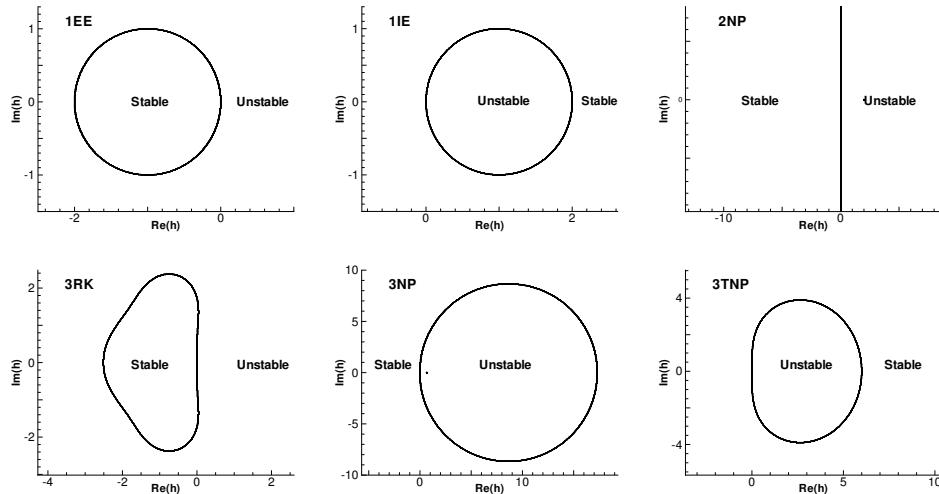


图 6.1 不同格式在  $h$  复平面上稳定区域

Figure 6.1 Region of the stability in complex  $h$  plane for different schemes

## 6.4 不同格式的数值比较

本节将利用数值例子，考察所发展方法的精度及稳定特性。

算例 1. 首先我们研究如下方程 [277]

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x) = -50(x - \cos t) \quad (6.22)$$

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 6.2 给出不同方法的求解结果。参考解为三阶 Runge-Kutta 格式在  $N = 3000$  时  
间步下计算结果。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。

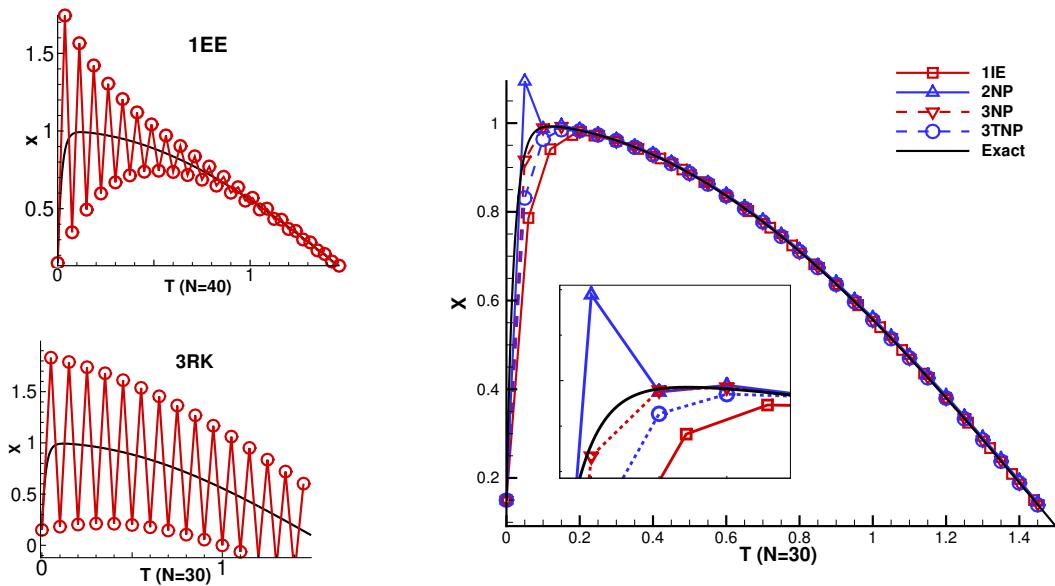


图 6.2 不同格式求解 ODE 方程 (6.22) 结果

Figure 6.2 Numerical results of Equation (6.22)

算例 2. 方程

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x) = -x^3, x_0 = 1, t = [0, 1] \quad (6.23)$$

该方程的精确解为

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

同样可求得摄动系数为

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

表 6.1 给出不同方法的误差和计算精度，可以看到，各个格式都能达到它们理论精度，但三阶 NP 和三阶 TNP 格式的误差要小于三阶 RK 格式。

## 6.5 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、稳定的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，验证了该类格式，的精度和稳定特性，其中三阶 TNP 格式表现了更好的性能。在下面章节中，我们将会把三阶 TNP 格式

**表 6.1 不同 ODE 格式精度分析****Table 6.1 The accuracy of different schemes**

Scheme	N	$L_1$ error	$L_1$ order	$L_\infty$ error	$L_\infty$ 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

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。



## 第七章 双信息保存方法在刚性化学反应流动中的应用

在爆轰波的计算中，除了可能存在如上一章所讨论的由于 ODE 方程刚性所导致的时间求解问题外，还可能产生一种由空间处理不当而导致非物理解现象，与时间刚性问题相对应，这种问题可以称为空间刚性问题。如在文 [202] 中，该问题是指出爆轰波波速或爆轰波结构可能会出现虚假结果的现象。

### 7.1 空间刚性问题形成过程的简单分析

空间刚性问题的研究主要针对的是有反应源项的 Euler 方程系统，即方程组 (1.5)。然而该方程系统由于耦合了流动和反应过程，对于分析问题而言过分复杂。1990 年 Yee 等人发现即便在含源项的线性对流方程 (7.1) 中，也可能存在空间刚性问题。下面我们就该方程简单的分析非物理解产生的过程和原因。

$$\frac{\partial z}{\partial t} + \frac{\partial z}{\partial x} = -\mu z(z - 0.5)(z - 1) \quad (7.1)$$

方程 (7.1) 中的  $\mu$  是可调参数，如果  $\mu$  很大时候，方程 (7.1) 中会存在时间刚性，为了避免时间刚性的影响，可以采用极小的时间步进行求解。便于说明问题，这里采用一种特殊的初始条件

$$z_0(x) = \begin{cases} 1, & x \leq 0.3 \\ 0, & x > 0.3 \end{cases}$$

由于初始条件中只包含 0 和 1 两个值，因此源项并不激活，在每个位置都应该为 0。但是在真实的计算中并非如此。我们知道，如果采用离散的数值方法进行计算时，例如采用有限差分方法时，不可避免会引入数值耗散，这样原本如图 7.1.a 的波形会变成图 7.1.b 中所示的情况；假设间断运动一个网格的时间为  $\delta t$ ，如果  $\mu$  较小时，点  $i$  和  $i+1$  的源项在  $\delta t$  时间内产生的影响同样很小，最后可能变成如图 7.1.c 中的结果；但是如果  $\mu$  值很大，而网格不够精细时，错误的源项值在  $\delta t$  内的累积同样会很大，ODE 过程产生的影响可能会如图 7.1.d 所示，这种错误的源项激活过程因此而导致非物理解的出现。

通过上述简单的分析表明：数值求解含源项对流方程时遇到的非物理解问题，主要是由于空间网格不足和数值耗散共同作用而导致的源项错误激发造成的。

## 7.2 求解反应 Euler 方程的分裂方法

一维化学反应欧拉方程为

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = \mathbf{S} \quad (7.2)$$

其中

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

方程 (7.2) 可以分裂为如下形式

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{U}_1}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_1}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial \mathbf{U}_2}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_2}{\partial x} = \mathbf{S}_1 \end{cases} \quad (7.3)$$

其中

$$\mathbf{U}_1 = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ E \end{pmatrix}, \mathbf{F}_1 = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(E + p) \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{U}_2 = \begin{pmatrix} \rho z_1 \\ \rho z_2 \\ \vdots \\ \rho z_{ns-1} \end{pmatrix}, \mathbf{F}_2 = \begin{pmatrix} \rho u z_1 \\ \rho u z_2 \\ \vdots \\ \rho u z_{ns-1} \end{pmatrix}, \mathbf{S}_1 = \begin{pmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \\ \vdots \\ \omega_{ns-1} \end{pmatrix}$$

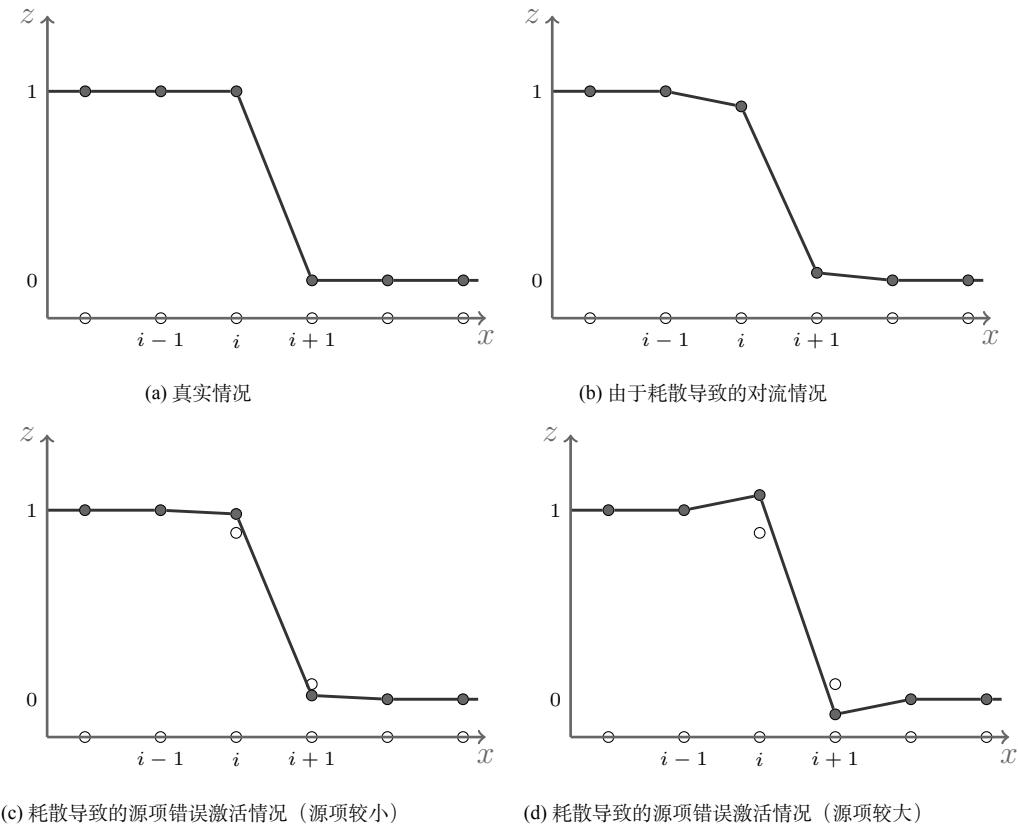


图 7.1 含源项线性对流方程刚性问题示意图

Figure 7.1 Sketches of the stiff problem in the convection equation with source term

方程(7.3)中第二项可以展开为

$$\mathbf{Z} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{Z} \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \rho \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial t} + \rho u \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial x} = \mathbf{S}_1 \quad (7.4)$$

其中  $\mathbf{Z} = (z_1, z_2, \dots, z_{ns-1})^T$ 。根据质量守恒方程可以得到

$$\frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial t} + u \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial x} = \mathbf{S}_e \quad (7.5)$$

其中  $\mathbf{S}_e = \mathbf{S}_1 / \rho = (\omega_1 / \rho, \omega_2 / \rho, \dots, \omega_{ns-1} / \rho)^T$ 。

可以看到，方程(7.5)和含源项的线性对流方程(7.1)具有相似的形式，由此也可以推测，组分对流方程中的数值耗散同样可能会导致反应欧拉方程求解中的非物理结果。

方程(7.5)可以算子分裂成对流项和反应项两部分。这样我们可以构造一种新的分裂

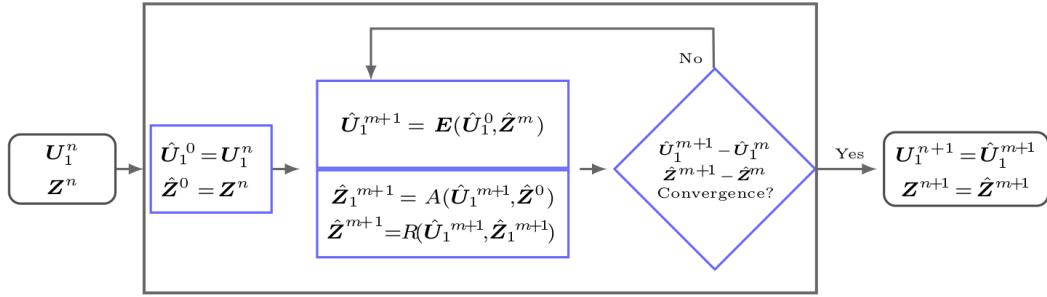


图 7.2 分裂方法迭代过程流程图

Figure 7.2 The framework of the solving process for the decoupling method

方法将方程 (7.3) 分裂为如下具有不同特点的三部分

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{U}_1}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_1}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial t} + u \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial x} = 0 \end{cases} \quad (7.6)$$

$$\frac{d\mathbf{Z}}{dt} = \mathbf{S}_e \quad (7.7)$$

$$\frac{d\mathbf{Z}}{dt} = \mathbf{S}_e \quad (7.8)$$

为了减小分裂误差，我们提出利用迭代的方式来求解方程 (7.6 - 7.8)，具体的计算过程如流程图 7.2 所示，其中  $\hat{\mathbf{U}}_1$  和  $\hat{\mathbf{Z}}$  是迭代过程的中间变量， $E$ ,  $A$  和  $R$  分别代表求解欧拉方程 (7.6)、组分对流方程 (7.7) 和反应 ODE 方程 (7.8) 的算子。

### 7.3 DIP 方法在反应 Euler 方程求解中的应用

从当前的文献看，主要有两种处理刚性问题的方式：一种是限制源项错误的激活过程，如 Zhang 等人提出的平衡态方法 [197]，Bao 和 Jin 提出的随机投影方法 [203–205]，及 Wang 等提出的反应步子网格重构方法 [198] 等，但是这些方法都需要对刚性做一些预先的假设。另一种减小刚性的方法是限制数值耗散，如 Chu 和 Shu 提出的反耗散 WENO 格式 [283] 和 Yee 等人提出的非线性限制器方法等 [211]，但是想从 Euler 方程角度消除耗散几乎是不可能的，虽然减小耗散有利于抑制刚性问题的产生，但是即便很小的耗散也足以导致非物理状态的激发 [210]。

在第五章中，我们构造了界面捕捉的 DIP 方法，并通过数值算例验证了 DIP 方法具有较强的界面捕捉能力。而化学反应界面正是耗散界面的一种，因此在本章中，我们希望将 DIP 方法应用于 (7.7) 的求解，通过限制 (7.7) 的耗散来避免非物理解的产生。用 DIP 方法求解方程 (7.7) 的过程与第五章中给出的算法是一致的，由于 (7.7) 可能是组

分方程组，因此向量  $Z$  中每个组元都处于相同的速度场，因而不会增加信息点数量。另外，由于反应界面是有厚度的耗散界面，因此我们应该采用针对于耗散界面的处理方法。

## 7.4 NP 方法在反应源项 ODE 求解中的应用

由于 ODE 方程 (7.8) 可能是刚性的，因此我们采用上一章提出的三阶变形数值摄动 (3TNP) 格式 (6.10) 来求解方程 (7.8)。由于摄动系数与方程 (7.8) 中的源项相关，因此，根据本章算例中可能用到的反应模型，给出具体的 3TNP 格式形式。

### 7.4.1 固定比热比单步总包反应模型

单步总包反应采用的源项为

$$S_e = -K(T)z \quad (7.9)$$

对应的 3TNP 格式为

$$z_{n+1} = z_n + \Delta t f(t, z_n) / \bar{p}_3 \quad (7.10)$$

其中

$$\begin{aligned} \bar{p}_3 &= \frac{1 + b_1 \Delta t + b_2 \Delta t^2}{1 - b_2 \Delta t} \\ b_1 &= a_1 - \frac{a_2}{a_1 + 1}, \quad b_2 = \frac{a_2}{a_1 + 1} \end{aligned}$$

$a_1$  和  $a_2$  通过源项求得

$$a_1 = -\frac{1}{2}K(T), \quad a_2 = \frac{1}{12}K(T)^2$$

### 7.4.2 固定比热比多步反应模型

多步反应模型中  $Z$  和  $S_e$  都是向量，源项形式为

$$s_i = \frac{W_i}{\rho} \sum_{k=1}^{nr} (\mu''_{i,k} - \mu'_{i,k}) K_k \prod_j \left( \frac{\rho z_j}{W_j} \right)^{\mu'_{j,k}}, \quad s_1 = 1, 2, \dots, ns - 1$$

对应的 3TNP 格式为

$$z_{i,j}^{n+1} = z_{i,j}^n + \frac{1}{\bar{p}_i} \Delta t s_i(z_{i,j}^n), \quad i = 1, 2, \dots, ns - 1$$

其中

$$\bar{p}_i = \frac{1 + b_{i,1}\Delta t + b_{i,2}\Delta t^2}{1 - b_{i,2}\Delta t},$$

$b_1$  和  $b_2$  同样是向量

$$b_{i,1} = a_{i,1} - \frac{a_{i,2}}{a_{i,1} + 1}, \quad b_{i,2} = \frac{a_{i,2}}{a_{i,1} + 1},$$

$a_1$  和  $a_2$  表达式为

$$a_{i,1} = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{ns} \frac{\partial s_i}{\partial z_j} s_j / s_i$$

$$a_{i,2} = -\frac{1}{6} \sum_{j=1}^{ns} \sum_{k=1}^{ns} \left( \frac{\partial^2 s_i}{\partial z_j \partial z_k} s_j s_k + \frac{\partial s_i}{\partial z_j} \frac{\partial s_j}{\partial z_k} s_k \right) / s_i + a_{i,1}^2$$

由于源项形式过于复杂，导数的表达式推导起来比较困难，这里我们采用数值导数进行近似

$$\frac{\partial s_i}{\partial z_j} = \frac{s_i(z_j + \Delta z) - s_i(z_j)}{\Delta z}$$

其中  $\Delta z$  是相对于  $z_j$  的一个小量，这里选取为

$$\Delta z = \begin{cases} z_j/100, & z_j \neq 0 \\ 0.001, & z_j = 0 \end{cases}$$

## 7.5 数值算例

本章新的求解方法计算的是方程(7.6-7.8)，对 Euler 方程(7.6)采用 LF 分裂方法(2.3)、五阶 WENO 空间离散格式(章节 2.1.2)和三阶 Runge-Kutta 时间离散格式(2.17)；在组分对流步(7.7)采用 DIP 方法；在反应步采用 3TNP 格式。作为对照，我们采用 [197, 198, 203] 等引文中常用的分裂方法，将方程(7.2)算子分裂成如下对流步和反应步两部分

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = 0 \tag{7.11}$$

$$\frac{d\mathbf{U}}{dt} = \mathbf{S} \quad (7.12)$$

在对流步同样采用 LF 方法、五阶 WENO 格式和三阶 Runge-Kutta 方法；在反应步采用 3TNP 格式。为了简便，在以下的算例中，我们将这种方法称作传统方法，在图中用“WENO5”进行标记。

### 7.5.1 线性对流方程算例

首先我们求解线性对流方程 (7.1) 及初始条件

$$u_0(x) = \begin{cases} 1, & x \leq 0.3 \\ 0, & x > 0.3 \end{cases}$$

$\mu = 10$  和  $\mu = 10000$  的两种情况，网格  $N = 200$ ，计算时间  $T = 0.3$ 。该问题的精确解为

$$u_0(x) = \begin{cases} 1, & x \leq t + 0.3 \\ 0, & x > t + 0.3 \end{cases}$$

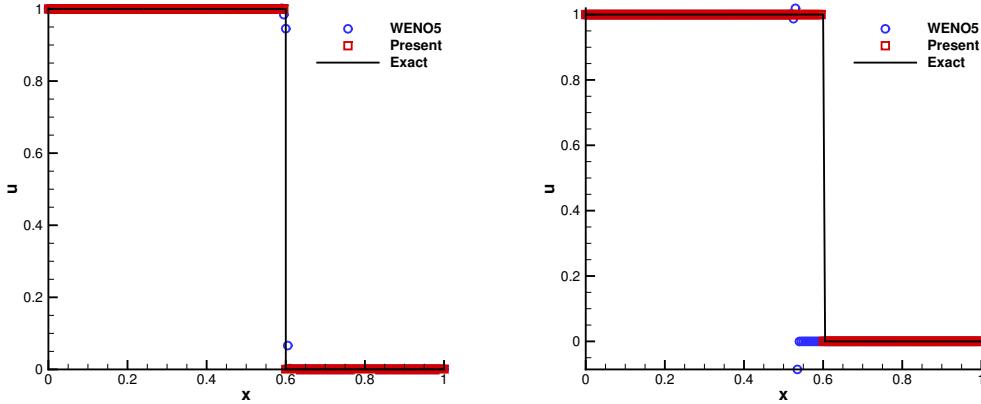
图 7.3 中左图为  $\mu = 10$  的计算结果，从图中可以看到，在间断处，采用了传统方法不可避免的会存在耗散，因此会导致源项出现错误的激发，但是由于源项较小，并不存在错误的波速和结构。右图中给出了  $\mu = 10000$  的计算结果，可以看到，由于  $\mu$  值较大，刚性问题比较严重，即表明在  $\mu$  值较大时，源项的错误激发较严重，导致错误的计算结果。而由于新的方法对线性方程不存在耗散，因此不会产生源项的错误激发，对两种情况都能准确计算间断的传播。

### 7.5.2 单步总包反应模型算例

#### Example 7.1.

我们考虑一个臭氧分解的 Chapman-Jouguet (C-J) 爆轰算例 [198, 202, 203, 284]，该算例中采用 Arrhenius 源项 (1.7)，所用到的常参数为

$$(\gamma, q_0, K_0, T_{\text{ign}}) = (1.4, 0.5196 \times 10^{10}, 0.5825 \times 10^{10}, 0.1155 \times 10^{10})$$

图 7.3 线性对流方程算例,  $t = 0.3$ , 左图:  $\mu = 10$ ; 右图:  $\mu = 10000$ Figure 7.3 Numerical results of Equation (7.1), left:  $\mu = 10$ ; right:  $\mu = 10000$ 

反应开始时, 左、右分别为已燃气体和未燃气体:

$$(\rho, u, p, z) = \begin{cases} (\rho_b, u_b, p_b, 0), & x \leq 0.005 \\ (\rho_0, u_0, p_0, 1), & x > 0.005 \end{cases}$$

其中  $\rho_0 = 1.201 \times 10^{-3}$ ,  $p_0 = 8.321 \times 10^5$  以及  $u_0 = 0$ 。已燃气体状态可以通过 C-J 关系计算得到 [202, 285–287]

$$\begin{aligned} p_b &= -b + (b^2 - c)^{1/2}, \\ \rho_b &= \rho_u [p_b(\gamma + 1) - p_u]/(\gamma p_b), \\ S_{cj} &= [\rho_0 u_0 + (\gamma p_b \rho_b)^{1/2}]/\rho_0, \\ u_b &= S_{cj} - (\gamma p_b / \rho_b)^{1/2}, \\ b &= -p_u - \rho_u q_0(\gamma - 1), \\ c &= p_u^2 + 2(\gamma - 1)p_u \rho_u q_0 / (\gamma + 1), \end{aligned} \tag{7.13}$$

其中  $S_{cj}$  是爆轰波波速。

该问题选用的计算区域为  $[0, 0.005]$ 。参考解 “exact” 是采用传统方法在  $\Delta x = 5 \times 10^{-6}$  (即  $N = 10000$ ) 的加密网格下计算得到的, 这一网格尺度可以完全求解该问题 [202, 203, 284]。

图 7.4 和图 7.5 给出  $t = 3 \times 10^{-7}$  时刻采用  $N = 50$  和  $N = 300$  网格下的计算结果, 图中可以看到, 新的方法即便在极为稀疏的网格下也能很好的捕捉爆轰波的传播, 而传统方法产生了虚假的物理解。

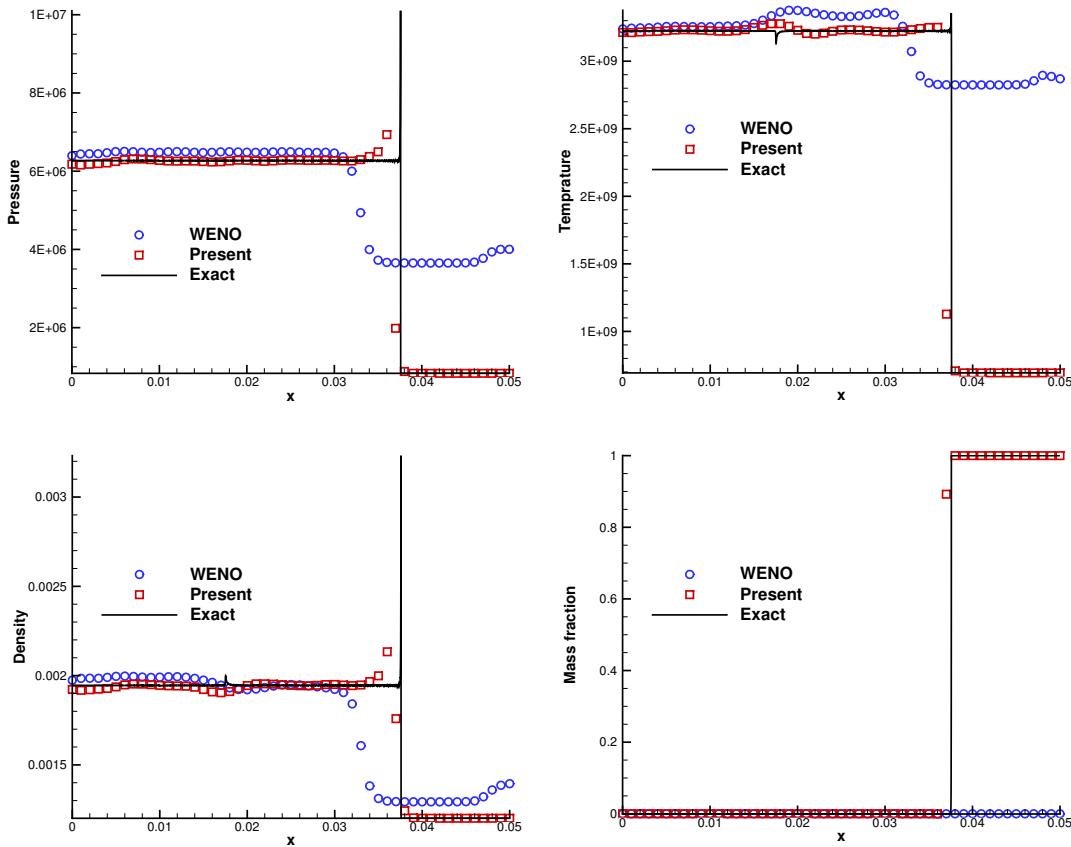
图 7.4 算例 7.1 的计算结果,  $t = 3 \times 10^{-7}$ ,  $N = 50$ 

Figure 7.4 Numerical results of Example 7.1

Kotov 等人 [288] 指出 CFL 数会影响虚假解的产生, 另外, 增加刚性系数同样会影响到非物理的产生。为了验证新方法是否存在这两个问题, 我们将  $K_0$  增加到  $100K_0$ , 采用  $N = 300$  网格。从图 7.6 中可以看到, 采用了新方法, CFL 数对结果的影响很轻微, 几乎可以忽略。

我们还利用该算例测试了 7.2 中的迭代过程, 每一迭代步的误差通过

$$\text{error} = \max_{1 \leq i \leq N} |u_i^{n,m+1} - u_i^{n,m}|$$

进行度量。

误差的收敛曲线在图 7.7 中给出, 从中可以看到, 迭代过程对于减小误差是极为有效的。由于第一步中迭代误差就已经足够小了, 因此考虑到计算效率, 在该类刚性问题的求解中我们只采用一步迭代过程。

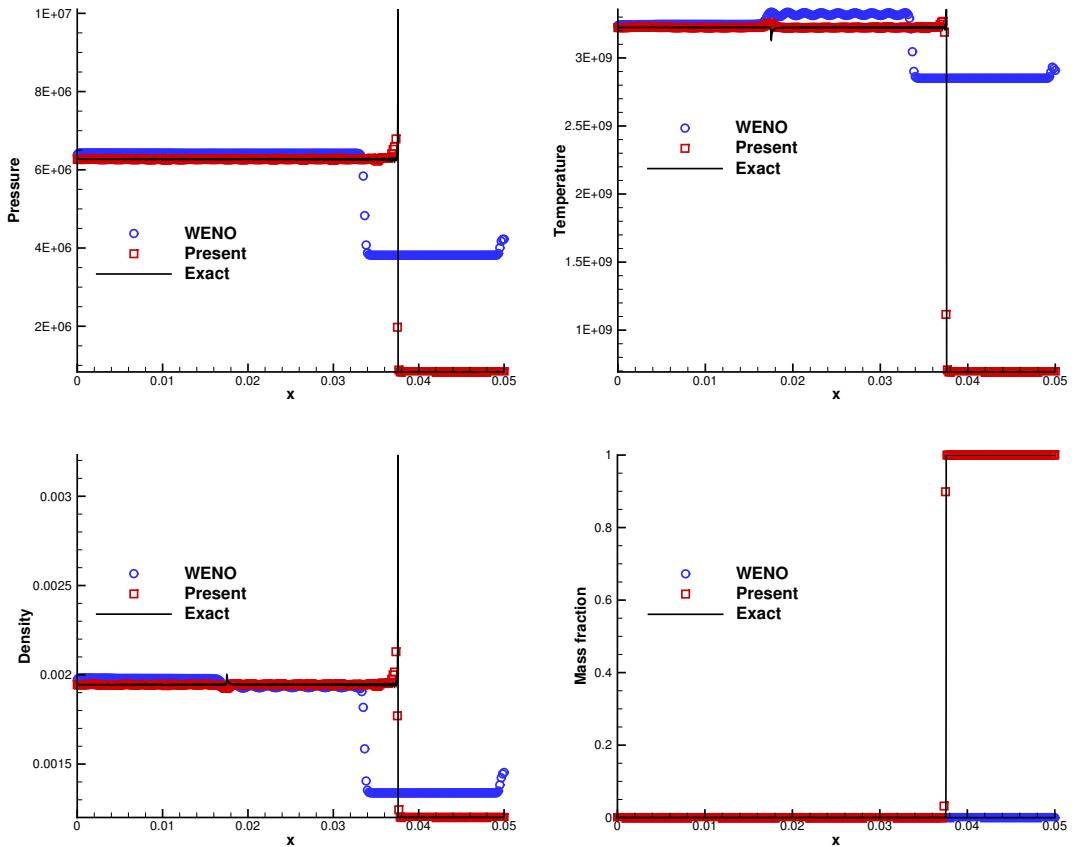


图 7.5 算例 7.1 的计算结果,  $t = 3 \times 10^{-7}$ ,  $N = 300$

Figure 7.5 Numerical results of Example 7.1,  $t = 3 \times 10^{-7}$ ,  $N = 300$

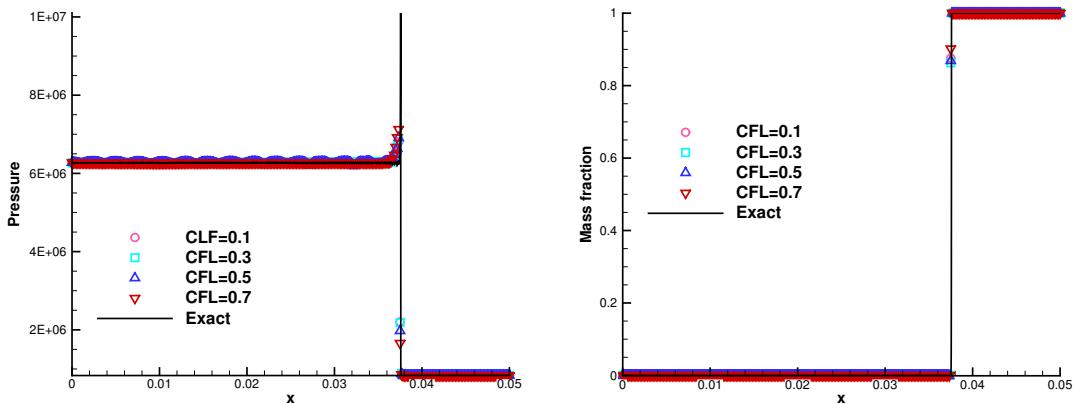


图 7.6 算例 7.1 采用  $100/\epsilon$  的计算结果,  $t = 3 \times 10^{-7}$ ,  $N = 300$

Figure 7.6 Numerical results of Example 7.1 with  $100/\epsilon$ ,  $t = 3 \times 10^{-7}$ ,  $N = 300$

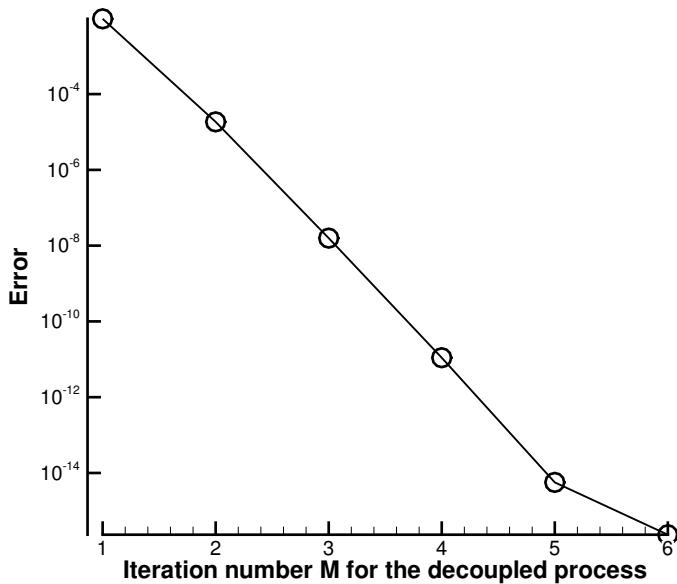


图 7.7 算例 7.1 中迭代过程收敛曲线

Figure 7.7 Convergence history of Example 7.1

**Example 7.2.**

该算例我们研究一个拥有更复杂波系的问题 [197, 198, 204, 289]。该算例采用 Heaviside 源项模型，用到的参数为

$$(\gamma, q_0, 1/\epsilon, T_{\text{ign}}) = (1.2, 50, 230.75, 3)$$

初始条件为

$$(\rho, u, p, z) = \begin{cases} (2, 4, 40, 0), & x \leq 10, \\ (3.64282, 6.2489548244, 0), & 10 < x \leq 20 \\ (1, 0, 1, 1), & x > 20 \end{cases}$$

解中包含一道右行强爆轰波，一道右行稀疏波，一道右行接触间断和一道左行稀疏波。参考解通过  $N = 10,000$  网格求得。图 7.8 和图 7.9 给出  $T = 8$  时刻  $N = 50$  和  $N = 300$  网格下的计算结果（采用  $100/\epsilon$ ）。可以看到，新的方法即便在更严重的刚性问题中也可以很好的捕捉流场中的各种波系，而采用了传统方法，爆轰波已经传出了右侧边界。

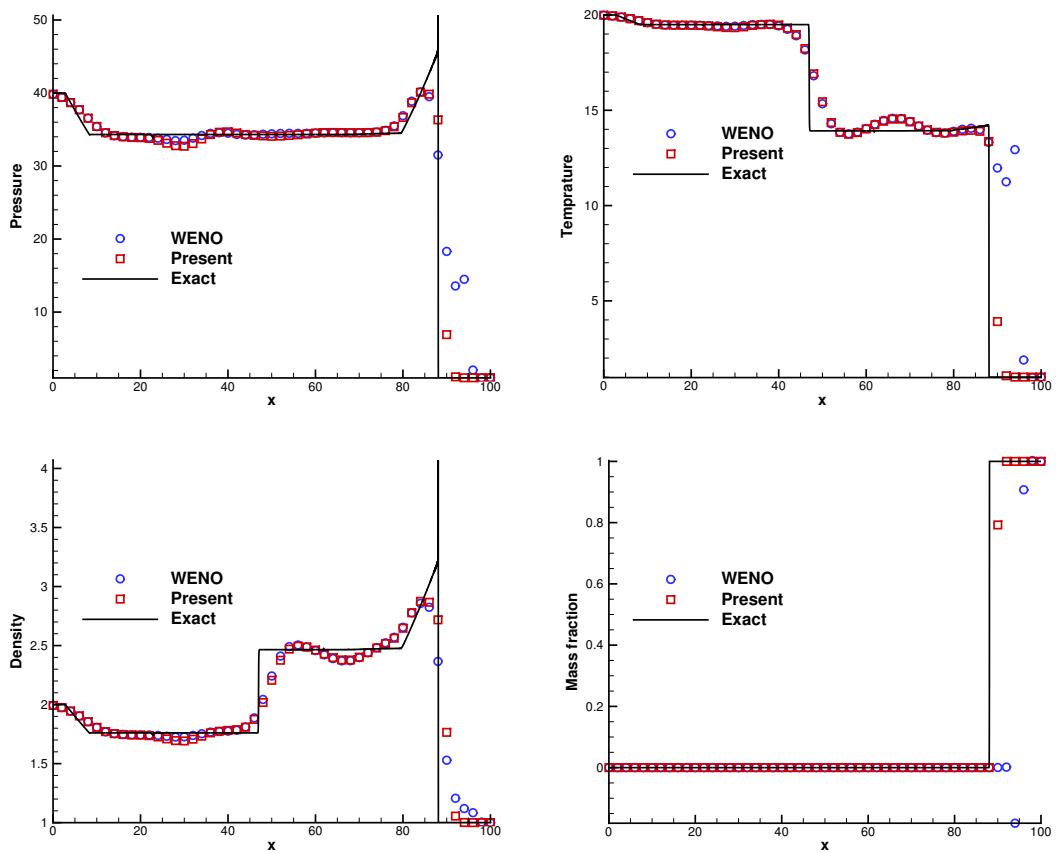


图 7.8 算例 7.2 的计算结果,  $t = 8$ ,  $N = 50$

Figure 7.8 Numerical results of Example 7.2,  $t = 8$ ,  $N = 50$

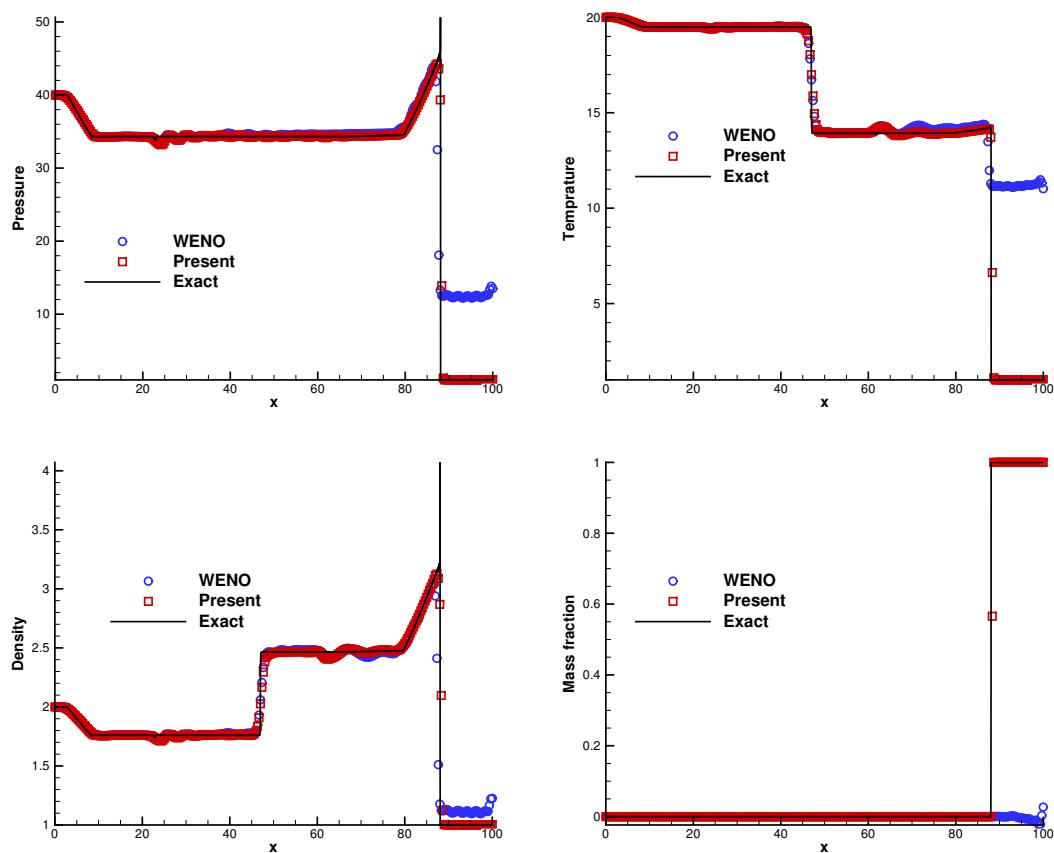


图 7.9 算例 7.2 采用  $100/\epsilon$  的计算结果,  $t = 8$ ,  $N = 300$

Figure 7.9 Numerical results of Example 7.2,  $t = 8$ ,  $N = 300$

**Example 7.3.**

该章节最后一个一维算例计算的是爆轰波和正弦熵波间的相互作用 [198, 203]，该算例采用 Heaviside 源项模型，用到的参数为

$$(\gamma, q_0, 1/\epsilon, T_{ign}) = (1.2, 50, 1000, 3)$$

初始条件为

$$(\rho, u, p, z) = \begin{cases} (1.79463, 3.0151, 21.53134, 0), & x \leq \frac{\pi}{2} \\ (3.64282, 6.248954.8244, 0), & x > \frac{\pi}{2} \end{cases}$$

仍然采用  $N = 10,000$  的结果作为参考解。图 7.10 给出  $t = \pi/2$  时刻  $N = 300$  网格下的计算结果，可以看到传统方法并不能很好的捕捉爆轰波波面，而新的方法在光滑区和间断区都有很好的结果。

**Example 7.4.**

下面考虑一个二维爆轰波算例 [197, 198, 203]，一道爆轰波在矩形区域从左向右传播。该算例中我们采用 Arrhenius 源项模型， $\gamma, q_0, K_0, T_{ign}$  等参数与算例 7.1 中相同。初始条件为

$$(\rho, u, v, p, z) = \begin{cases} (\rho_b, u_b, 0, p_b, 0), & x \leq \xi(y) \\ (1.201 \times 10^{-3}, 0, 0, 8.321 \times 10^5, 1), & x > \xi(y) \end{cases}$$

$$\xi(y) = \begin{cases} 0.004, & |y - 0.0025| \geq 0.001 \\ 0.005 - |y - 0.0025|, & |y - 0.0025| < 0.001 \end{cases}$$

其中  $\rho_b, u_b$  和  $p_b$  都是通过方程 (7.13) 计算得到。

参考解是采用传统方法在  $N = 2000 \times 400$  网格下计算得到的。图 7.11 给出初始时刻和最终时刻 ( $t = 1.4 \times 10^{-7}$ ) 的参考结果。图 7.12 给出新方法分别采用网格  $N = 150 \times 50$  和网格  $N = 600 \times 200$  在时刻  $t = 0, t_1 = 0.28 \times 10^{-7}, t_2 = 0.7 \times 10^{-7}, t_3 = 1.12 \times 10^{-7}$  和  $t_4 = 1.4 \times 10^{-7}$  的计算结果。可以看到，对不同网格，爆轰波的位置都吻合的很好，即便在最粗糙的网格下，仍然可以求解出流场中的结构。我们在图 7.13 中给出传统方法和新的方法采用  $N = 600 \times 200$  网格，在直线  $y = 0.005$  上的计算结果，可以看到，新方法计算结果与参考解吻合的很好，而传统格式的计算结果表现出和一维算例中相似的非物理

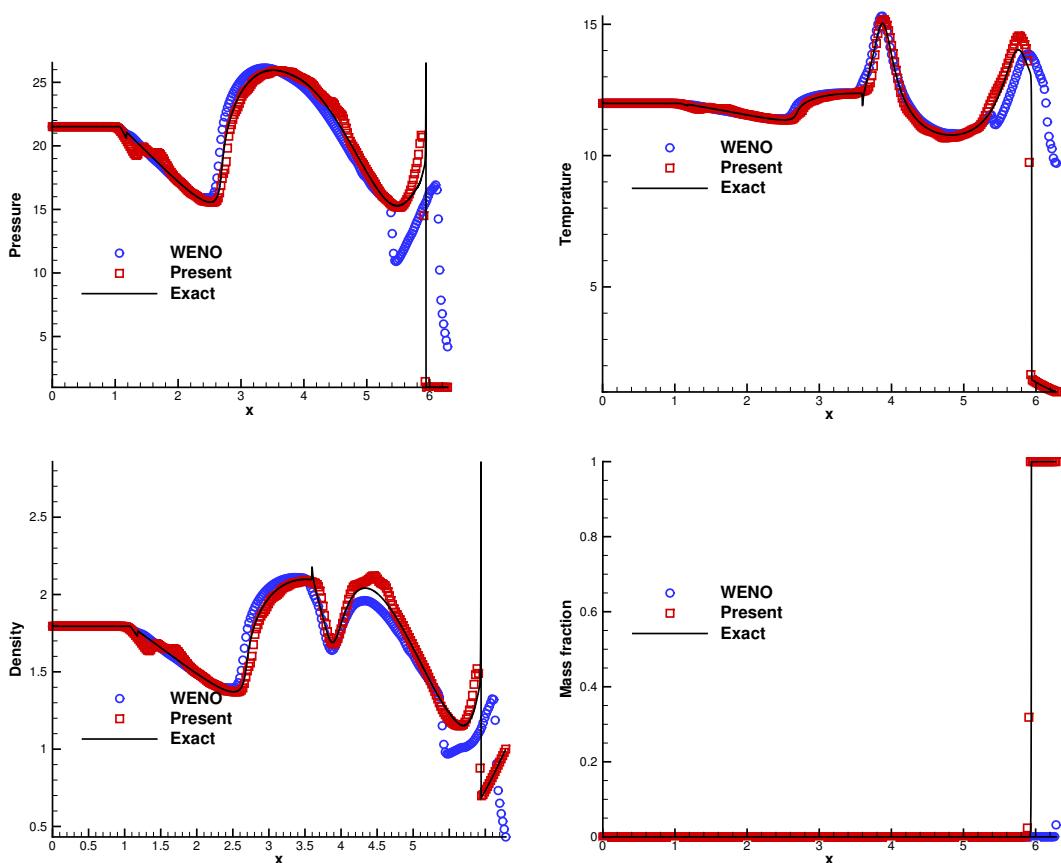


图 7.10 算例 7.3 的计算结果,  $t = \pi/2$ ,  $N = 300$

Figure 7.10 Numerical results of Example 7.3,  $t = \pi/2$ ,  $N = 300$

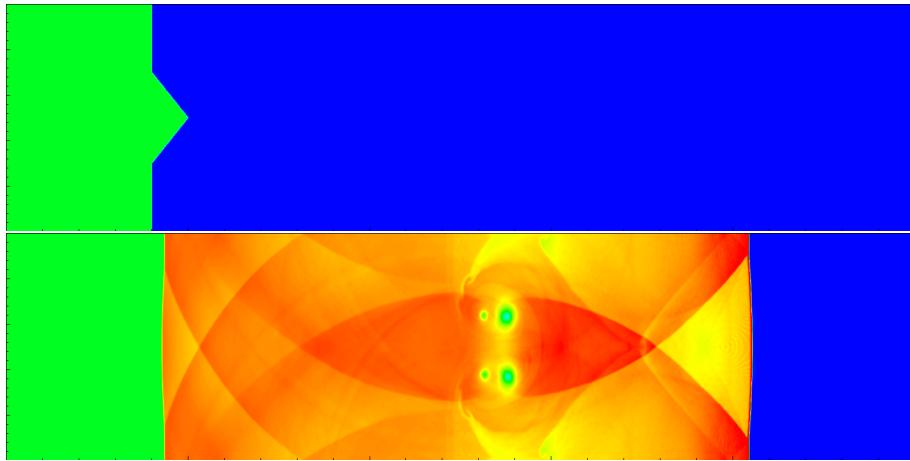


图 7.11 算例 7.4 的密度等值线图, 采用传统方法,  $t = 0$  和  $t = 1.4 \times 10^{-7}$ ,  $N = 2000 \times 400$

Figure 7.11 Density contours of Example 7.4 by the traditional method,  $t = 0$  and  $t = 1.4 \times 10^{-7}$ ,  $N = 2000 \times 400$

问题。

### Example 7.5.

这是另一个二维问题 [204, 290]。该问题采用 Heaviside 源项模型, 用到的参数为

$$(\gamma, q_0, K_0, T_{\text{ign}}) = (1.2, 50, 1000, 2)$$

初始条件为

$$(\rho, u, v, p, z) = \begin{cases} (1.79463, 10x/r, 10y/r, 21.53134, 0), & r \leq 10 \\ (1, 0, 0, 1, 1), & r > 10 \end{cases}$$

其中

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}$$

该算例求解的是在球面爆轰波在矩形区域内的传播问题。参考解 “exact” 是通过传统方法在  $N = 1000 \times 500$  的加密网格下求解得到。图 7.14 给出采用  $N = 200 \times 100$  网格分别在时刻  $t_1 = 0, t_2 = 1, t_3 = 3$  和  $t_4 = 5$  的爆轰波波面位置结果。可以看到新的方法可以准确的捕捉爆轰波面位置。图 7.15 给出  $t = 5$  时刻的结果对比。可以看到, 新方法的计算结果无论是压力、密度、温度、还是组分质量分数都能很好的与参考解吻合, 而传统方法由于数值刚性问题, 导致质量分数出现了完全不同的分布。

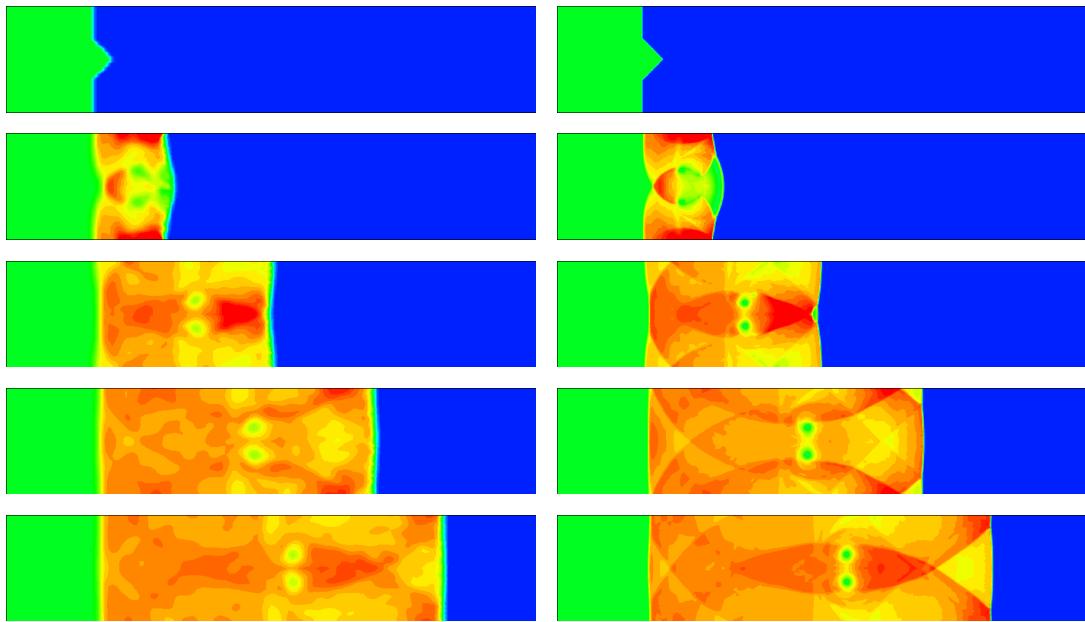


图 7.12 算例 7.4, 新的方法在时刻  $0, 0.25 \times 10^{-7}, 0.7 \times 10^{-7}, 1.12 \times 10^{-7}$  和  $1.4 \times 10^{-7}$  的计算结果。  
左侧:  $N = 150 \times 50$ , 右侧:  $N = 600 \times 200$

**Figure 7.12 Density contours of Example 7.4 at time ( 0,  $0.25 \times 10^{-7}$ ,  $0.7 \times 10^{-7}$ ,  $1.12 \times 10^{-7}$  和  $1.4 \times 10^{-7}$ ), the present method**

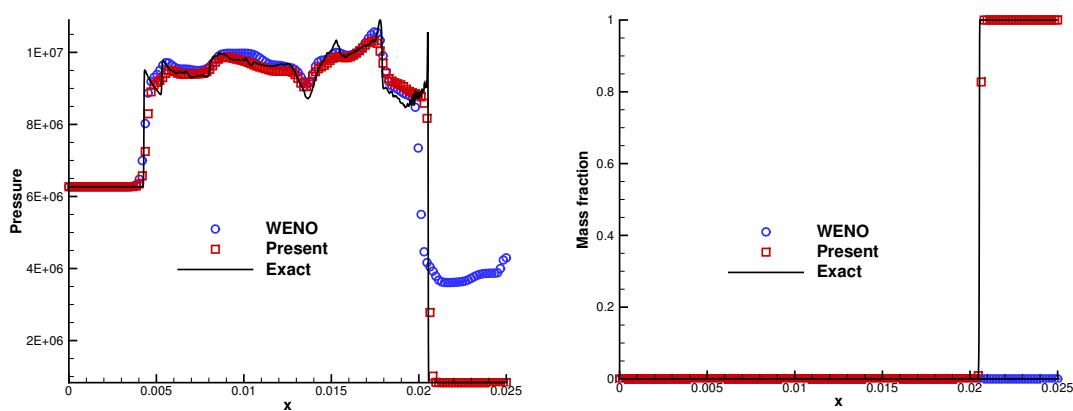
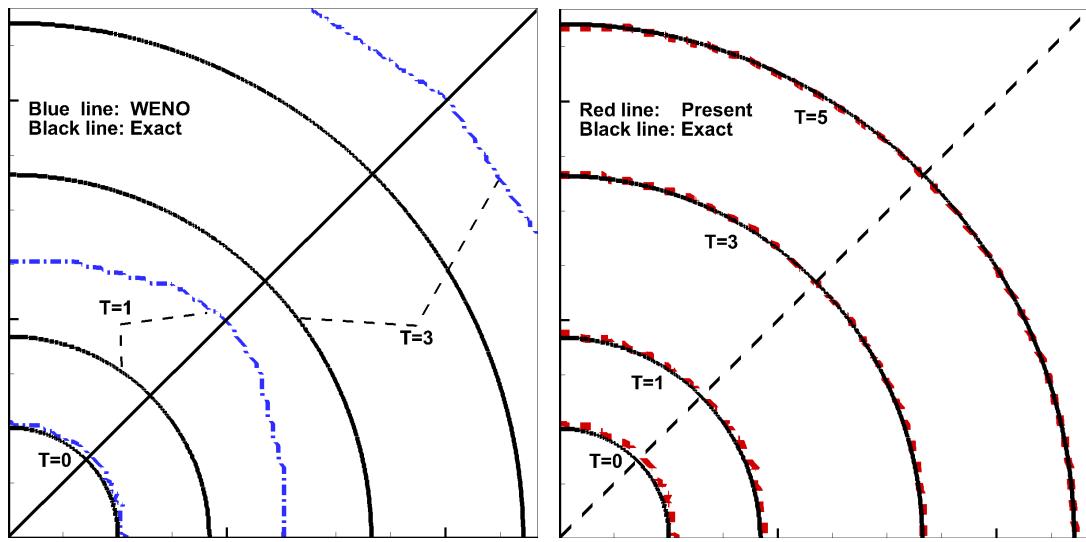


图 7.13 算例7.4, 不同方法在直线  $y = 0.0025$  上的计算结果,  $t = 1.4 \times 10^{-7}$

**Figure 7.13 The distribution one the line  $y = 0.0025$  of Example 7.4,  $t = 1.4 \times 10^{-7}$**

图 7.14 算例 7.5 在  $z = 0.5$  上的质量分数曲线Figure 7.14 Mass fraction ( $z = 0.5$ ) of Example 7.5

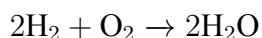
### 7.5.3 固定比热比多组分模型算例

在上一小节的总包反应模型计算中，由于反应速率和组分是正比关系，因此在刚性问题中，较大的反应速度导致整个反应区域都被压缩到激波区域，无法识别，这在上面所有的算例中都能看出。因此，对于采用了总包反应模型的刚性问题，甚至可以采用无厚度的界面模型进行追踪。

我们在章节 1.1.3 中给出了固定比热比多组分反应模型的相关公式，从公式(1.10)中可以看出，多步反应模型中的反应速度是和所有组分变化都相关的。因此，即便在存在空间刚性的问题中，反应区一般也同时存在非刚性的区域，导致反应区有明显的厚度，无厚度的界面模型不再能求解这类问题，预先刚性假设的方法也不再适用于这些问题。下面我们将通过算例更好的展示多组分的刚性问题特点以及新方法的表现。

#### Example 7.6.

第一个多组分算例在文献 [197,205] 中有过相关的研究，该问题采用一个极为简单的反应模型



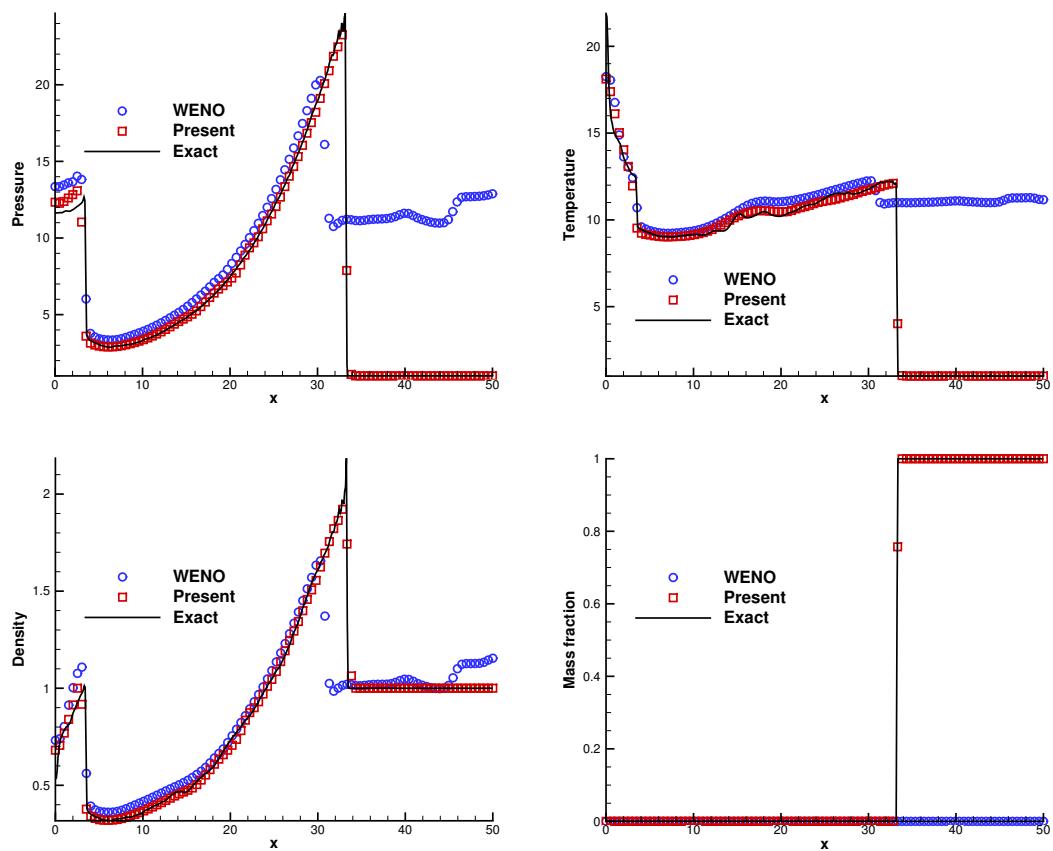


图 7.15 算例 7.5 对角线上的计算结果对比,  $t = 5$

Figure 7.15 Comparison of the numerical results on the diagonal line, Example 7.5,  $t = 5$

源项采用 Heaviside 模型，用到的参数为

$$(\gamma, T_{\text{ign}}, 1/\epsilon, q_{\text{H}_2}, q_{\text{O}_2}, q_{\text{H}_2\text{O}}, W_{\text{H}_2}, W_{\text{O}_2}, W_{\text{H}_2\text{O}}) = (1.4, 2, 10^6, 100, 0, 0, 2, 32, 18)$$

初始条件为

$$(\rho, u, p, z_{\text{H}_2\text{O}}, z_{\text{O}_2}, z_{\text{H}_2}) = \begin{cases} (2, 8, 20, 0, 0, 1), & 0 \leq x \leq 2.5 \\ (1, 0, 1, 1/9, 8/9, 0), & 2.5 < x \leq 50 \end{cases}$$

参考解是采用传统方法在  $N = 10,000$  网格下计算得到。采用  $N = 200$  网格在  $t = 4$  时刻的计算结果展示在图 7.16 中。可以看到，不论传统方法还是新的方法都能很好的捕捉爆轰波的传播。然而，与文献 [197] 中类似，将  $q_{\text{H}_2}$  从 100 增大到 300 时，采用了传统方法的结果（图 7.17）中又出现非物理结构，而新的方法仍然能很好的计算爆轰波。

### Example 7.7.

第二个一维多组分算例同样引于文献 [205]。反应模型包含五个组分和两个反应



其中组分  $\text{N}_2$  作为缓冲剂。文献 [205] 中采用的参数为

$$(\gamma, T_{\text{ign}}, 1/\epsilon_1, 1/\epsilon_2) = (1.4, 2, 10, 10^5, 2 \times 10^4)$$

$$(q_{\text{H}_2}, q_{\text{O}_2}, q_{\text{OH}}, q_{\text{H}_2\text{O}}, q_{\text{N}_2}) = (0, 0, -20, -100, 0)$$

$$(W_{\text{H}_2}, W_{\text{O}_2}, W_{\text{OH}}, W_{\text{H}_2\text{O}}, W_{\text{N}_2}) = (2, 32, 17, 18, 28)$$

初始条件为

$$(\rho, u, p, z_{\text{H}_2}, z_{\text{O}_2}, z_{\text{OH}}, z_{\text{H}_2\text{O}}, z_{\text{N}_2}) = \begin{cases} (2, 10, 40, 0, 0, 0.17, 0.63, 0.2), & x \leq 0.5 \\ (1, 0, 1, 0.08, 0.72, 0, 0, 0.2), & x > 0.5 \end{cases}$$

计算域为  $[0, 50]$ 。参考解“exact”采用  $N = 10,000$  网格得到。图 7.18 给出压力、温度、 $\text{O}_2$  和  $\text{OH}$  的质量分数。可以看到，采用文献 [205] 中的参数，两种方法都能的到正

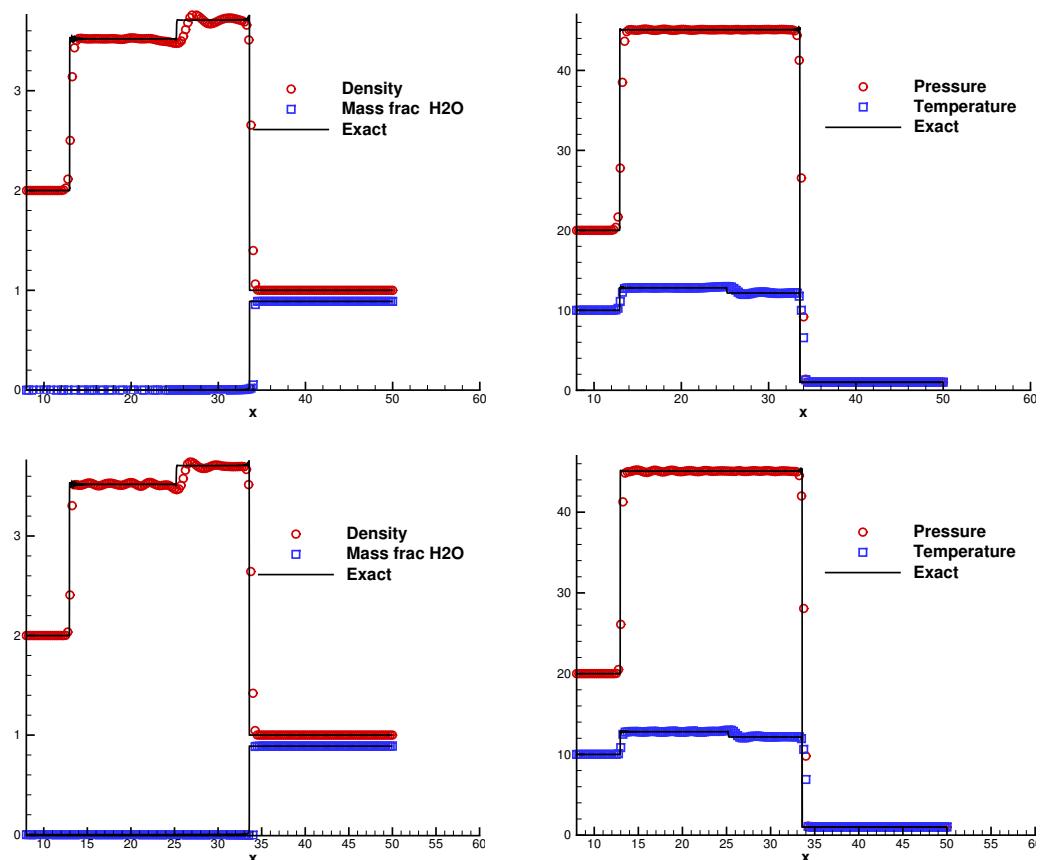


图 7.16 算例 7.6 计算结果,  $t = 4$ ,  $N = 200$ 。上图: 传统方法; 下图: 新方法

Figure 7.16 Numerical results of Example 7.6,  $t = 4$ ,  $N = 200$ , top: the traditional method; bottom: the present method

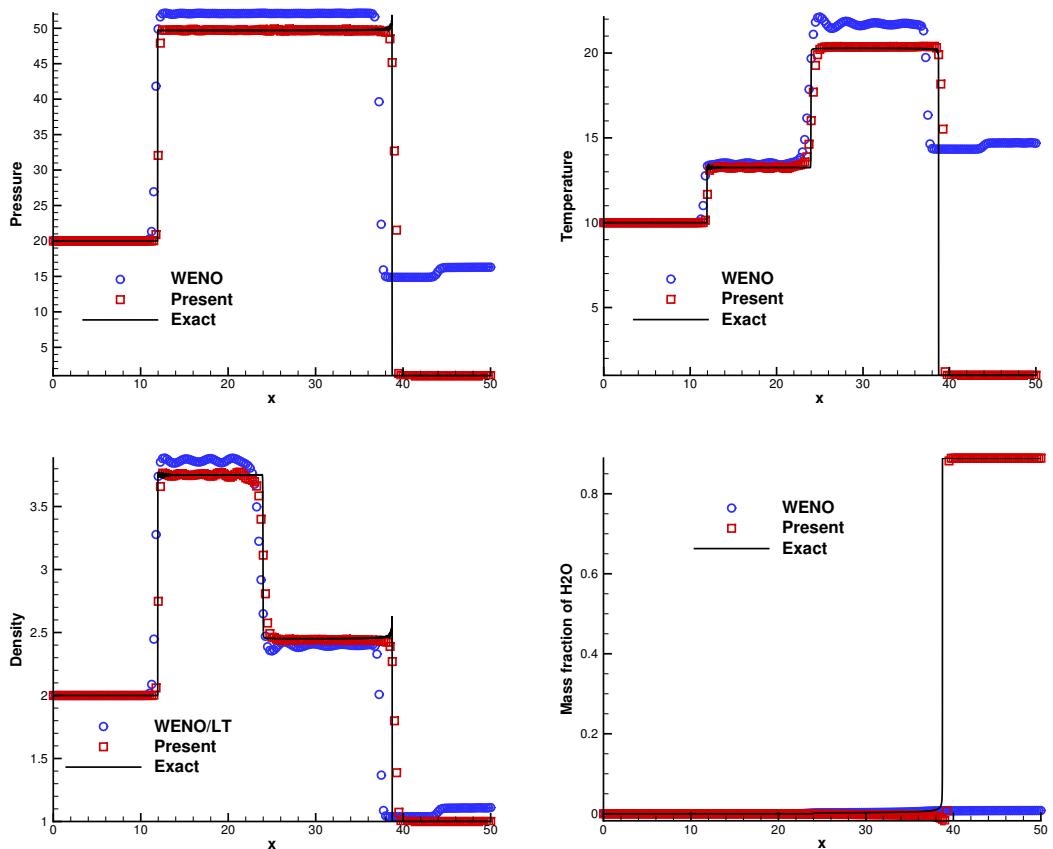


图 7.17 算例 7.6 采用  $k_{H_2} = 300$  的计算结果,  $t = 4$ ,  $N = 200$

Figure 7.17 Numerical results of Example 7.6 with  $k_{H_2} = 300$ ,  $t = 4$ ,  $N = 200$

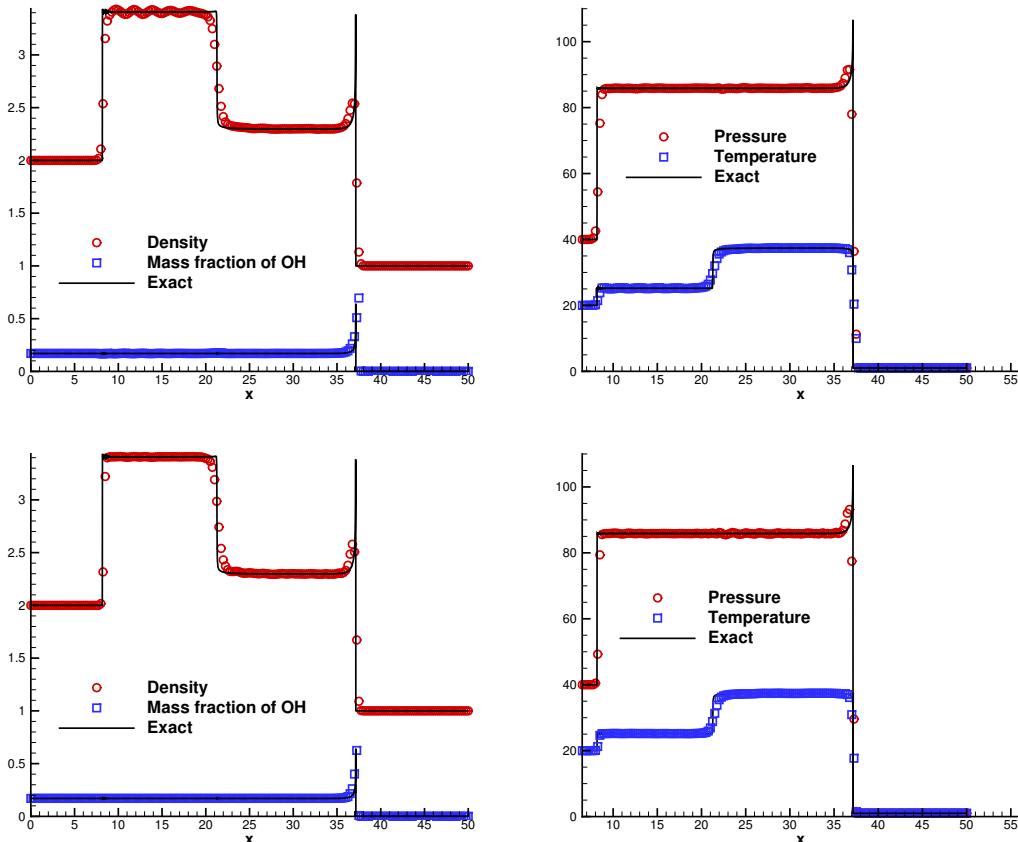


图 7.18 算例 7.7 计算结果,  $t = 3$ ,  $N = 200$ 。上图: 传统方法; 下图: 新方法

**Figure 7.18 Numerical results of Example 7.7,  $t = 3$ ,  $N = 200$ , upper: the traditional method, bottom: the present method**

确的结果, 但是传统方法会产生更多的振荡。

如果我们选用文献 [197] 中的参数, 采用一个更小的点火温度, 刚性会增强, 因而更容易得到刚性的结果。图 7.19 给出采用了  $T_{\text{ign}} = 1.5$  和  $q_{\text{H}_2} = -50$  的结果, 在这种情况下, 传统求解方法会得到一个分裂的间断面和更快的爆轰波波速, 而新方法仍能准确的求解。

### Example 7.8.

最后, 我们研究一个二维算例, 该算例引于文献 [205], 用到的所有常数都和算例 7.7 中相同。初始条件为

$$(\rho, u, v, p, z_{\text{H}_2}, z_{\text{O}_2}, z_{\text{OH}}, z_{\text{H}_2\text{O}}, z_{\text{N}_2}) = \begin{cases} (2, 10, 0, 40, 0, 0, 0.17, 0.63, 0.2), & x \leq \xi(y) \\ (1, 0, 1, 0.08, 0.72, 0, 0, 0.2), & x > \xi(y) \end{cases}$$

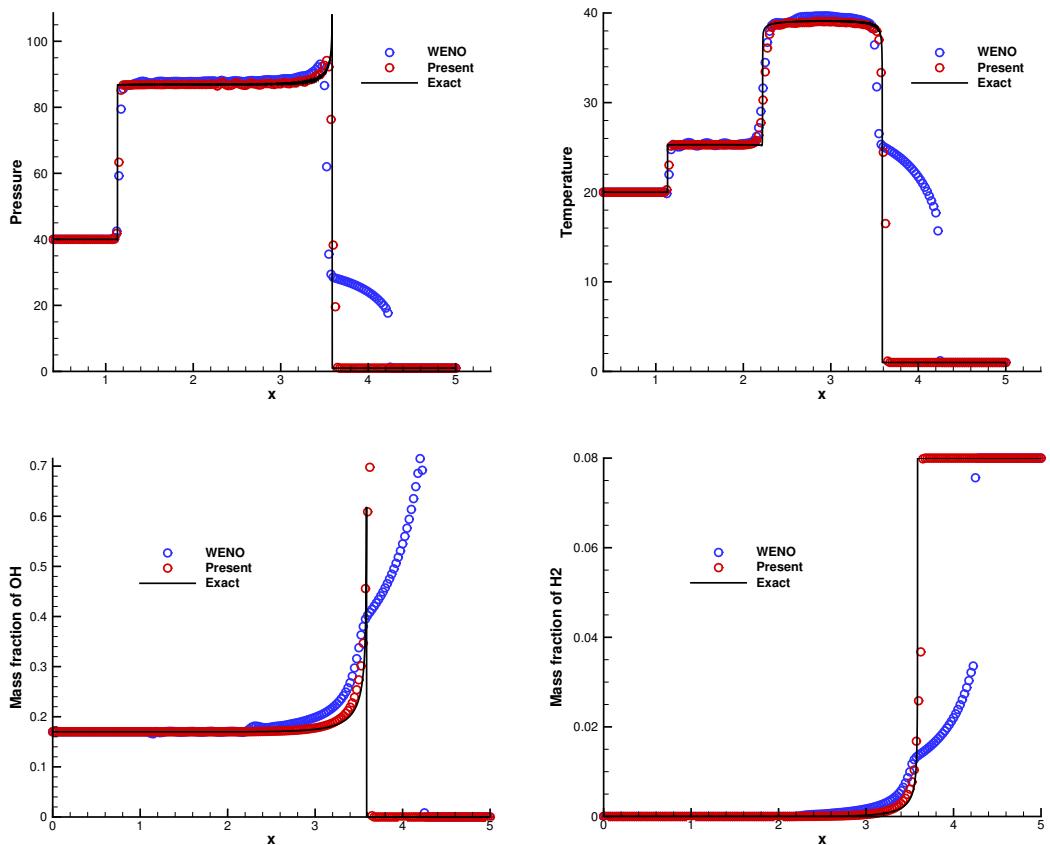


图 7.19 算例 7.7 采用  $T_{ign} = 1.5$  和  $q_{H_2} = -50$  的计算结果。 $t = 3$ ,  $N = 200$

Figure 7.19 Numerical results of Example 7.7 with  $T_{ign} = 1.5$  and  $q_{H_2} = -50$ ,  $t = 3$ ,  $N = 200$

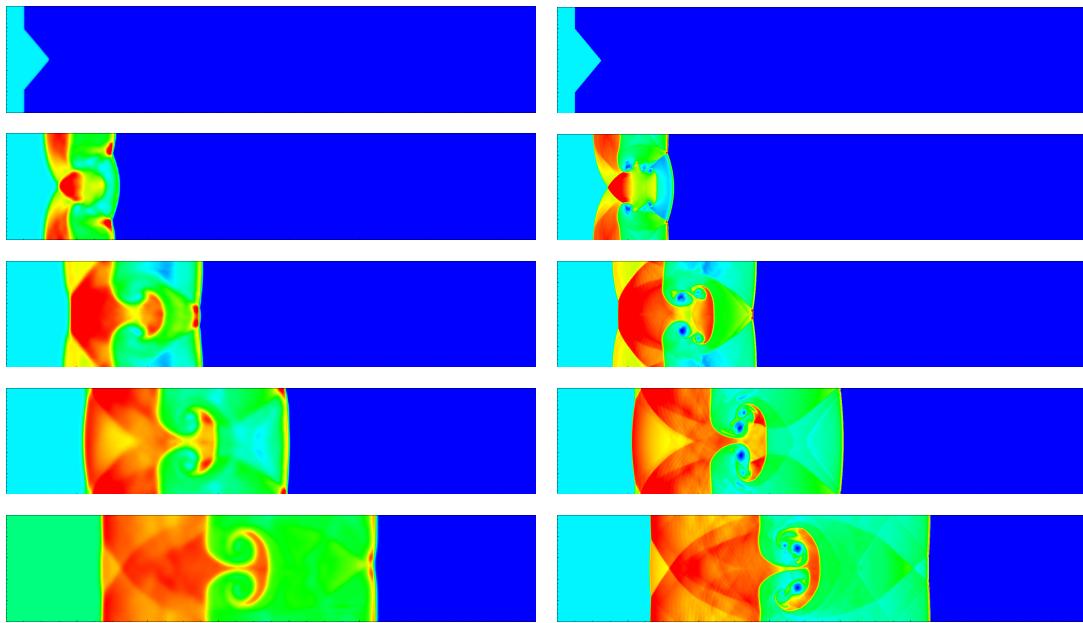


图 7.20 算例 7.8 在时刻  $t_1 = 0, t_2 = 2, t_3 = 4, t_4 = 6$  和  $t_5 = 8$  的密度等值线图。左图：新方法， $N = 300 \times 50$ ，右图：传统方法， $N = 1500 \times 250$

**Figure 7.20 Density contours of Example 7.8 at time ( $t_1 = 0, t_2 = 2, t_3 = 4, t_4 = 6$  和  $t_5 = 8$ ), left: the present method,  $N = 300 \times 50$ , right: the traditional method,  $N = 1500 \times 250$**

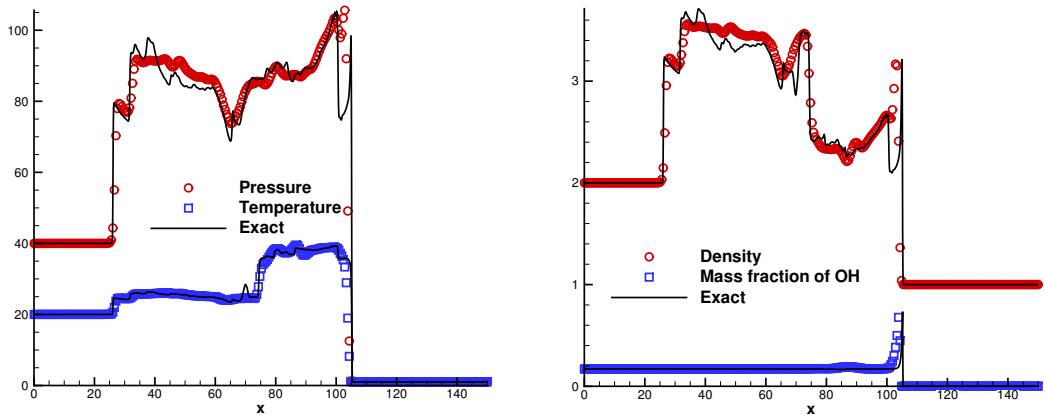
其中

$$\xi(y) = \begin{cases} 12.5 - |y - 12.5|, & |y - 12.5| \geq 7.5 \\ 5, & |y - 0.0025| < 7.5 \end{cases}$$

计算区域为  $[0, 150] \times [0, 25]$ 。图 7.20 给出新方法在网格  $N = 300 \times 50$  下，在时刻  $T_1 = 0, T_2 = 2, T_3 = 4, T_4 = 6$  和  $T_5 = 8$  的计算结果。为了便于比较，图中同时给出采用新方法在网格  $N = 1500 \times 250$  下的计算结果。可以看出，即便采用了较稀疏的网格，新方法仍然能求解流场中所有的结构。图 7.21 给出截取线  $y = 12.5$  上的结果，通过对比可以看到，新的方法的计算结果和参考解吻合的非常好。

## 7.6 小结

在本章中我们首先简单的从数值角度分析了化学反应流中空间刚性产生的原因。接下来，提出一种新型的分裂方法，将反应 Euler 方程分裂为 Euler 方程、组分对流方程和反应 ODE 方程三个具有不同求解特点的部分。针对于组分对流方程中数值耗散对虚假物理理解产生的作用，我们将第五中提出的 DIP 方法应用在该方程求解中，结合高精度的

图 7.21 算例 7.8 中在线  $y = 12.5$  上的计算结果,  $t = 8$ ,  $N = 300 \times 50$ Figure 7.21 distribution on the line  $y = 12.5$  of Example 7.8,  $t = 8$ ,  $N = 300 \times 50$ 

Euler 方程求解方法和稳定的反应步 ODE 方程 3TNP 求解方法, 发展了一套反应 Euler 方程求解方法, 有效的避免了非物理结果的产生。算例表明, 即便在极端的情况下, 如非常稀疏的网格或更大的源项刚性, 新的方法仍然能得到令人满意的結果。

## 第八章 双信息保存方法在基元反应模型爆轰中的应用

上一章我们探讨了在固定比热比的总包反应模型和多步反应模型中的空间刚性问题。如果计算需要更准确的模拟化学反应动力学过程时，一般采用基元反应模型进行模拟。在应用了基元反应模型的化学反应的计算中，通常不会出现空间刚性导致的非物理解，但是在求解中同样会遇到很多的难点，例如：

1. 不同组分由于反应速率的差别导致其反应区的长度也相差很大，在网格不足时，反应较快的组分难以准确计算，会产生过度的耗散和数值振荡。
2. 采用基元反应模型的源项 ODE 方程中同样存在着时间刚性问题。

考虑到无论是固定比热比的多步反应模型，还是基元反应模型，方程并没有本质变化，只是源项形式有所区别，而遇到的空间问题也都是由于网格不足和方法中的数值耗散造成的。因此，本章将针对带有基元反应模型的爆轰求解，研究 DIP 方法在基元反应模型中的有效性和鲁棒性。

### 8.1 基元反应模型中的热力学参数

在前言 1.1.3 中，我们给出了基元反应模型的源项形式和状态方程，其中各组分的热力学属性通常由实验和拟合得到，针对氢氧爆轰模型，本文采用了 JANAF [291] 给出的数据和拟合公式（其中  $i$  代表不同的组分）。

摩尔定压热容 (molar heat capacity) 为

$$\frac{C_{p,i}}{R_u} = a_{1,i} + a_{2,i}T + a_{3,i}T^2 + a_{4,i}T^3 + a_{5,i}T^4 \quad (8.1)$$

标准摩尔生成焓 (standard molar formation enthalpy) 和标准摩尔熵 (standard molar entropy) 都可以通过摩尔定压热容积分得到

$$H_i(T) = H_i^f + \int_0^T C_{pi}(s)ds \quad (8.2)$$

$$S_i(T) = S_i^f + \int_0^T \frac{C_{pi}(s)}{T} ds$$

将方程 (8.1) 带入 (8.2) 可以得到标准摩尔生成焓

$$\frac{H_{p,i}}{R_u T} = a_{1,i} + \frac{a_{2,i}}{2} T + a_{3,i} T^2 + a_{4,i} T^3 + a_{5,i} T^4 \quad (8.3)$$

同理，可以得到标准摩尔熵

$$\frac{H_{p,i}}{R_u T} = a_{1,i} \ln T + a_{2,i} T + \frac{a_{3,i}}{2} T^2 + \frac{a_{4,i}}{3} T^3 + \frac{a_{5,i}}{4} T^4 + a_{7,i} \quad (8.4)$$

不同的拟合参数  $a_1$   $a_7$  可参见附录 B。

## 8.2 温度求解方法

对于热完全气体混合物，温度并不存在显式的表达式，通常都需要采用迭代方法求解状态方程求得。对于混合气体，总能为

$$E = -p + \frac{1}{2}(u^2 + v^2) + \rho h \quad (8.5)$$

将上式与公式 (1.16) 联立，可以得到一个新的函数

$$f(T) = -E + \frac{1}{2}\rho u^2 + \rho h(T) - \rho RT \quad (8.6)$$

通过求解  $f(T) = 0$  获得温度，本文采用牛顿迭代法进行求解。

在分裂方法(章节 7.2)中，假定了对流过程和反应过程是相对独立的，因此化学反应过程可以看成是一个定容过程 [292]。这样在反应步求解温度时可以不需要迭代过程，进一步简化。根据定容假设，化学反应过程中内能保持不变，即

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{de}{dt} = 0 \\ \frac{d\rho_i}{dt} = \omega_i \end{array} \right. \quad (8.7)$$

内能是温度和质量分数的函数：

$$e = e(T, z) = \sum_{i=1}^{ns} z_i e_i(T) \quad (8.8)$$

对内能进行微分有

$$\begin{aligned} de &= \sum_{i=1}^{ns} e_i dz_i + dT \sum_{i=1}^{ns} z_i \frac{de_i(T)}{dT} \\ &= \sum_{i=1}^{ns} e_i dz_i + dT \sum_{i=1}^{ns} z_i c_{v,i} \end{aligned} \quad (8.9)$$

上式可以简化为

$$de = \sum_{i=1}^{ns} e_i dy_i + c_v dT \quad (8.10)$$

将  $de/dt = 0$  带入上式

$$c_v \frac{dT}{dt} = - \sum_{i=1}^{ns} e_i \frac{dy_i}{dt} = - \sum_{i=1}^{ns} e_i \frac{\omega_i}{\rho} \quad (8.11)$$

最后可得到

$$\frac{dT}{dt} = - \frac{1}{c_v} \sum_{i=1}^{ns} e_i \frac{\omega_i}{\rho}, \quad c_v = \sum_{i=1}^{ns} z_i c_{v,i} \quad (8.12)$$

利用公式 (8.12) 可以显式的求出下一步时间的温度，无需采用迭代。

在文献 [292] 中，通过数值算例，验证了定容假设下的无需迭代的温度求解方法和迭代方法是等效的，而计算效率有较大提高，因此本文将采用上述方法。但是这里要特别注意的是，定容假设只适用在反应步的计算中，而在对流步计算中，仍然需要迭代过程求解温度。

### 8.3 数值算例

本节中，我们将上一章构造的数值方法应用在氢氧爆轰的基元反应模型化学反应流动方程求解中。以下的算例采用 9 组分  $\text{H}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{O}$ ,  $\text{H}$ ,  $\text{OH}$ ,  $\text{HO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  和  $\text{Ar}$ , 21 反应的 BW 氢氧爆轰模型 [293]，化学反应速率常数由 Arrhenius 公式

$$K_{f,i} = A_k T^{b_i} \exp\left(\frac{-E_{a,i}}{R_u T}\right) \quad (8.13)$$

求得，具体参数见表 8.1，表中三体系数分别为

<sup>b</sup> 三体系数分别为：  $\text{H}_2 = 2.5$ ,  $\text{H}_2\text{O} = 12.0$ ,  $\text{O}_2 = 1.0$ ,  $\text{N}_2 = 1.0$

<sup>c</sup> 三体系数分别为：  $\text{H}_2 = 1.0$ ,  $\text{H}_2\text{O} = 6.5$ ,  $\text{O}_2 = 0.4$ ,  $\text{N}_2 = 0.4$

<sup>d</sup> 三体系数分别为：  $\text{H}_2 = 2.5$ ,  $\text{H}_2\text{O} = 15.0$ ,  $\text{O}_2 = 1.0$ ,  $\text{N}_2 = 1.0$

表 8.1 BW 氢氧爆轰模型 ( $\text{cm}^2\text{-mol}\cdot\text{s}\cdot\text{kcal}\cdot\text{K}$ )Table 8.1 BW detonation model ( $\text{cm}^2\text{-mol}\cdot\text{s}\cdot\text{kcal}\cdot\text{K}$ )

i	反应	$A_i$	$b_i$	$E_{a,i}$	备注
1.	$\text{H}+\text{O}_2=\text{OH}+\text{O}$	$3.52\times 10^{16}$	-0.7	17.07	
2.	$\text{H}_2+\text{O}=\text{OH}+\text{H}$	$5.06\times 10^4$	2.67	6.29	
3.	$\text{OH}+\text{OH}=\text{H}_2\text{O}+\text{O}$		$k=5.46\times 10^{11}\exp(0.00149T)$		
4.	$\text{H}_2+\text{OH}=\text{H}_2\text{O}+\text{H}$	$1.17\times 10^9$	1.3	3.626	
5.	$\text{H}+\text{O}_2+\text{M}=\text{HO}_2+\text{M}$	$6.76\times 10^{19}$	-1.42	0.0	b
6.	$\text{H}+\text{HO}_2=\text{OH}+\text{OH}$	$1.70\times 10^{14}$	0.0	0.874	
7.	$\text{H}+\text{HO}_2=\text{H}_2+\text{O}_2$	$4.28\times 10^{13}$	0.0	1.411	
8.	$\text{OH}+\text{HO}_2=\text{H}_2\text{O}+\text{O}_2$	$2.89\times 10^{13}$	0.0	-0.497	
9.	$\text{H}+\text{H}+\text{M}=\text{H}_2+\text{M}$	$1.80\times 10^{18}$	-1.0	0.0	c
10.	$\text{H}+\text{OH}+\text{M}=\text{H}_2\text{O}+\text{M}$	$2.20\times 10^{22}$	-2.0	0.0	b
11.	$\text{HO}_2+\text{HO}_2=\text{H}_2\text{O}_2+\text{O}_2$	$3.02\times 10^{12}$	0.0	1.39	
12.	$\text{H}_2\text{O}_2+\text{M}=\text{OH}+\text{OH}+\text{M}$	$1.20\times 10^{17}$	0.0	45.50	d
13.	$\text{H}_2\text{O}_2+\text{OH}=\text{H}_2\text{O}+\text{HO}_2$	$7.08\times 10^{12}$	0.0	1.43	
14.	$\text{O}+\text{HO}_2=\text{OH}+\text{O}_2$	$2.00\times 10^{13}$	0.0	0.0	
15.	$\text{H}+\text{HO}_2=\text{O}+\text{H}_2\text{O}$	$3.10\times 10^{13}$	0.0	1.72	
16.	$\text{H}+\text{O}+\text{M}=\text{OH}+\text{M}$	$6.20\times 10^{16}$	-0.6	0.0	b
17.	$\text{O}+\text{O}+\text{M}=\text{O}_2+\text{M}$	$6.17\times 10^{15}$	-0.5	0.0	b
18.	$\text{H}_2\text{O}_2+\text{H}=\text{H}_2\text{O}+\text{OH}$	$1.00\times 10^{13}$	0.0	3.59	
19.	$\text{H}_2\text{O}_2+\text{H}=\text{HO}_2+\text{H}_2$	$4.79\times 10^{13}$	0.0	7.95	
20.	$\text{O}+\text{OH}+\text{M}=\text{HO}_2+\text{M}$	$1.00\times 10^{16}$	0.0	0.0	
21.	$\text{H}_2+\text{O}_2=\text{OH}+\text{OH}$	$1.70\times 10^{13}$	0.0	47.78	

### 8.3.1 数值结果与分析

本小节中分别计算四种含有不同稀释剂的氢氧爆轰一维算例，并将计算结果和理论值及实验值进行对比，验证方法并分析稀释剂对爆轰稳定性和波速等特性的影响。计算域长为  $L$ ，左边采用固壁条件，右侧采用出流条件。最开始整个区域充满了  $\text{H}_2$ 、 $\text{O}_2$  和  $\text{Ar}$  混合物，在固壁端设置有一小段高温、高压点火区域，短时间内迅速引爆混合气体，产生右行的爆轰波。点火参数为  $P_{\text{ign}} = 28.0P_0$ 、 $\rho_{\text{ign}} = 5.0\rho_0$  和  $T_{\text{ign}} = 13.0T_0$ 。

由于 C-J 理论解和试验结果大约仅有 10% 左右的误差 [294]，我们可以用 C-J 理论的

波速作为理论参考，C-J 理论需求解下面的五方程系统得到波速和波后物理量

$$\begin{aligned}\rho_0(D_j - u_0) &= \rho_1(D_j - u_1) \\ p_1 - p_0 &= \rho_0(D_j - u_0)(u_1 - u_0) \\ e_1 - e_0 &= \frac{1}{2}(p_1 + p_0)(\nu_0 - \nu_1) + Q \\ e &= e(p, \nu) \\ D_j - u_1 &= c_1\end{aligned}\tag{8.14}$$

其中  $e = h + p/\rho + u^2/2$ 。

同时我们可以通过 ZND 理论，根据 C-J 波速求解稳定后最大压力—冯纽曼尖压力值  $P_N$ ，求解公式为

$$P_N = 2 \frac{\rho_0 D_j^2}{\gamma + 1} \tag{8.15}$$

其中  $D_j$  为爆轰波波速， $\gamma$  为反应物比热比。

### Example 8.1.



首先研究不含稀释剂的  $\text{H}_2$  和  $\text{O}_2$  以 2:1 的摩尔比例混合的工况 [295, 296]，计算区域为  $[0, 2m]$ ，计算时长为  $T = 700\mu\text{s}$ ，采用  $N = 8,000$  的网格。图 8.1.a 和图 8.1.b 给出了压力随时间发展的计算结果和放大图，图 8.1.c 给出爆轰波速随时间变化图。如文献 [294] 所讨论，该算例压强和波速并不能稳定收敛，而是波动的，波速平均值为  $D_j = 2750\text{m/s}$  和试验结果 [297, 298] 及理论参考解都很相近。由 ZND 理论计算求得的冯纽曼尖  $P_N = 610\text{KPa}$ ，而计算得到的压强最大值介于  $600\text{KPa} - 700\text{KPa}$  之间，也能较好的符合。从图 8.1.d 可以看到该算例中温度可以收敛到稳定值  $T = 3390\text{K}$ 。

### Example 8.2.



有较多学者对该算例进行过研究 [299–303]。该算例计算域为  $[0, 4m]$ ，计算时长为  $T = 1,600\mu\text{s}$ 。该计算采用  $N = 12,000$  的网格量。采用文献 [304, 305] 中给出的理论波速和实验波速作为参考。图 8.2.a 和图 8.2.b 给出压力分布随时间的发展，最大压力经过计算开始的振荡后，稳定升高。在爆轰波传播到  $2m$  时 ( $1000\mu\text{s}$ ) 压力分布尚未达到稳定值，因此需要给出更长时间的结果。图 8.2.c 给出波速发展图，可以看到波速趋势虽然收敛，但仍有较大的波动。平均波速介于实验波速和理论参考波速之间，较为合理， $P_N$  略低于 ZND 得到的理论值。从图 8.2.d 中可以看到，该算例温度稳定在  $3260\text{K}$ 。

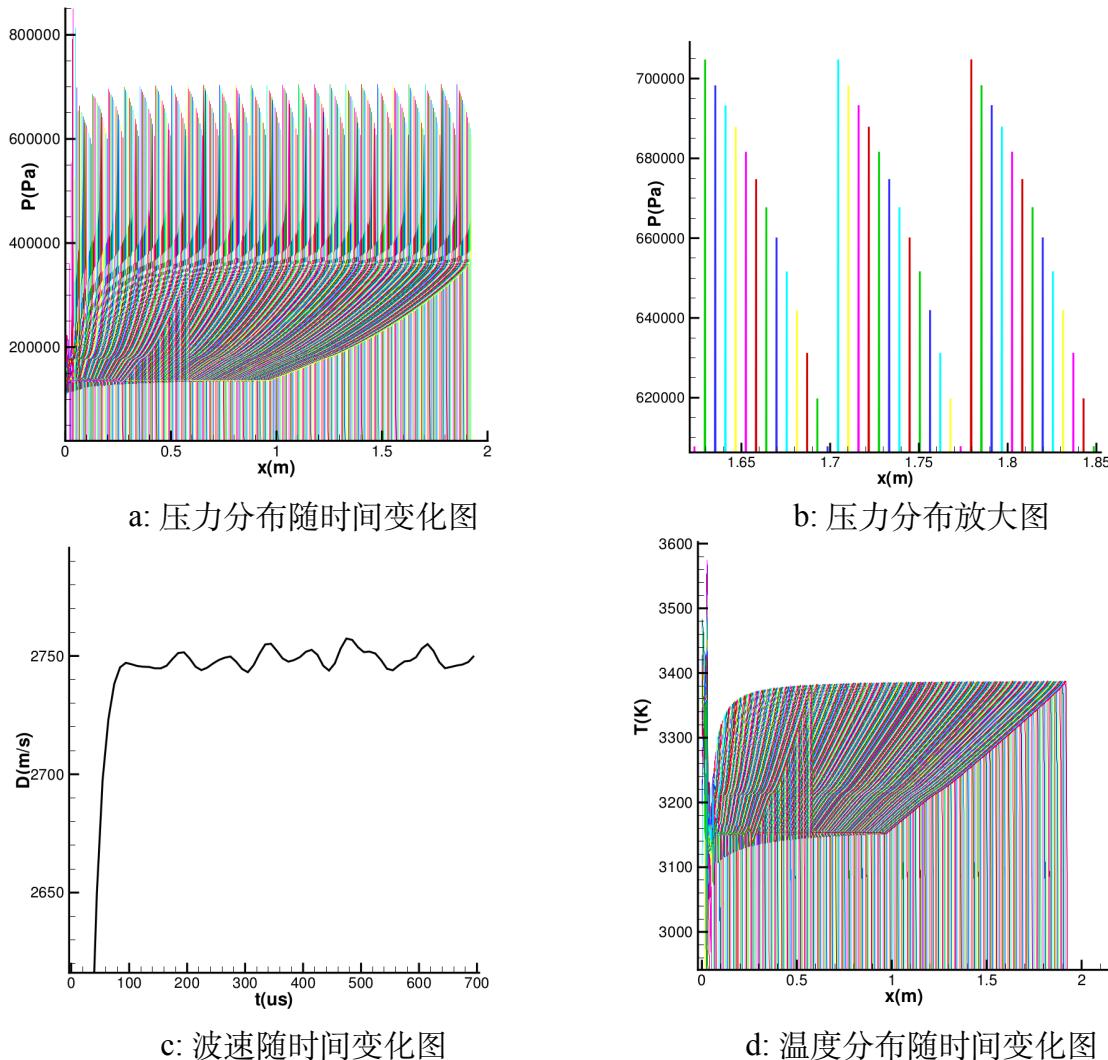


图 8.1  $2\text{H}_2+\text{O}_2$  算例计算结果

Figure 8.1 Numerical results of Example 8.1

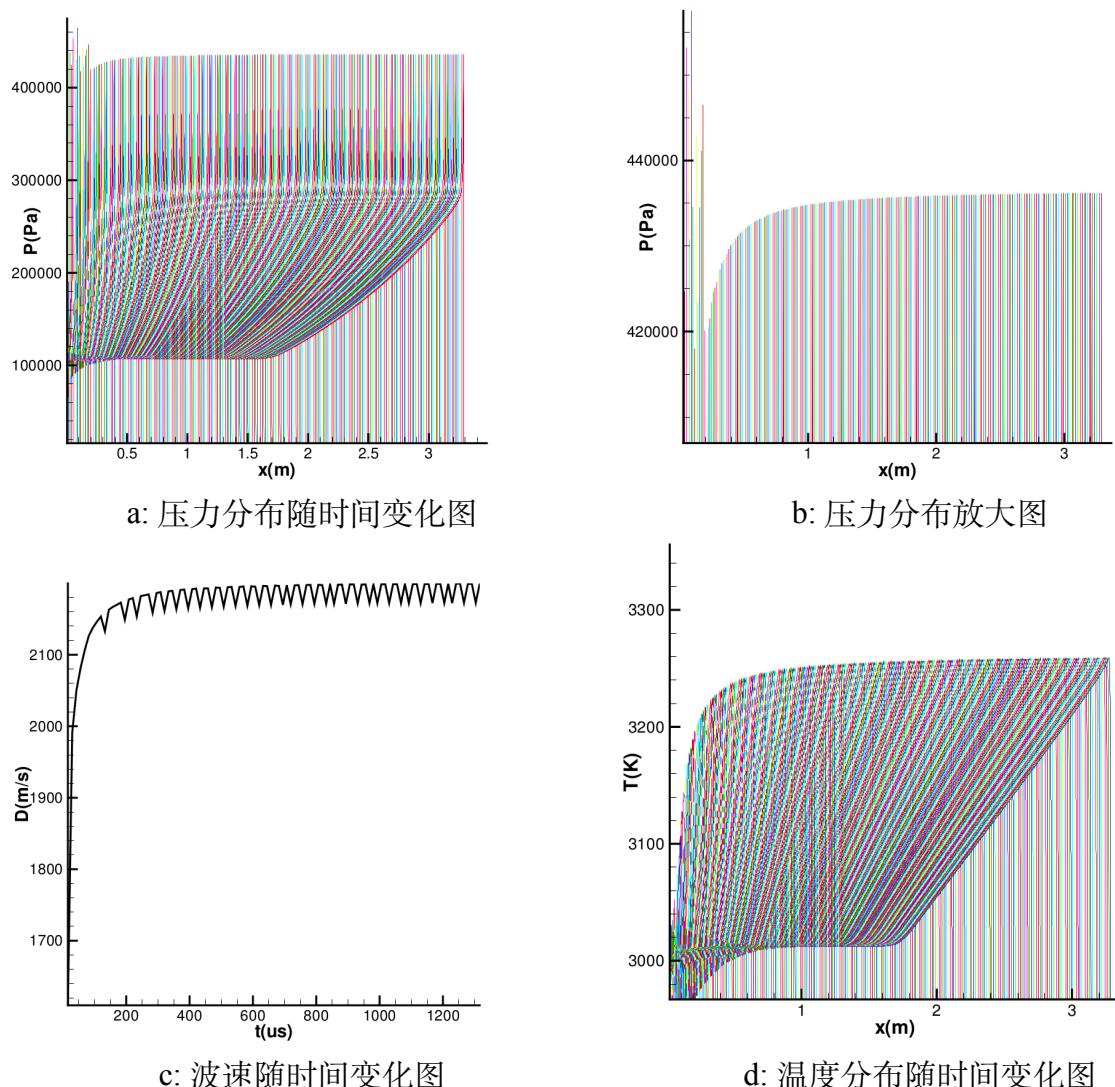


图 8.2  $2\text{H}_2+\text{O}_2+\text{Ar}$  算例计算结果

Figure 8.2 Numerical results of Example 8.2

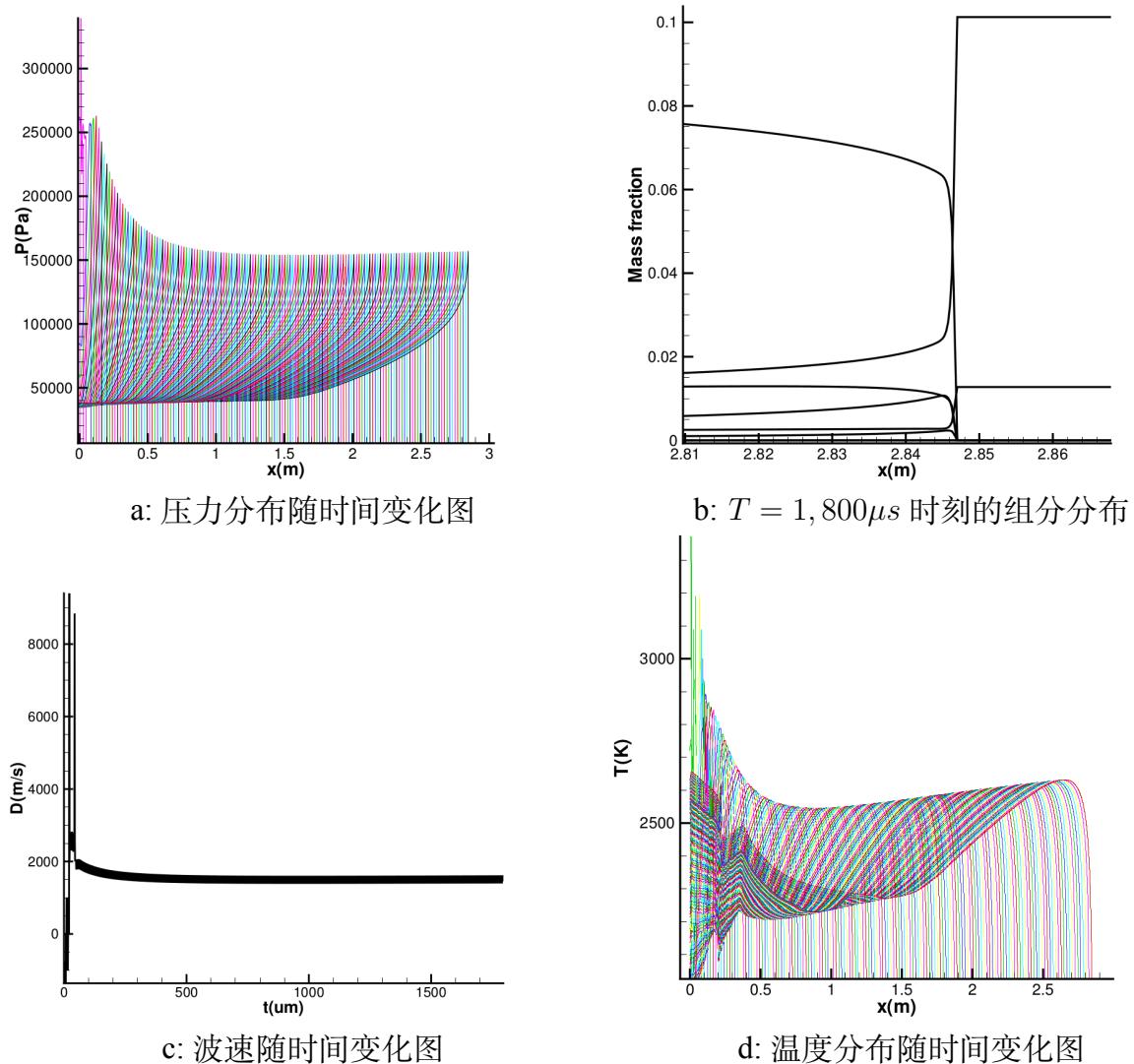
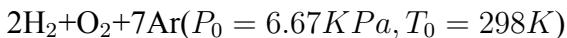
图 8.3  $2\text{H}_2+\text{O}_2+7\text{Ar}$  算例计算结果

Figure 8.3 Numerical results of Example 8.3

**Example 8.3.**

在文献 [299, 306, 307] 中有关于该算例的详细计算结果。计算区域选取为  $[0, 3m]$ ，计算时间  $T = 1800\mu s$ ，计算采用  $N = 12,000$  网格量。文献 [303] 中给出的实验波速为  $1550 m/s$ 。图 8.3.a 和图 8.3.b 给出压力分布随时间发展和波速随时间变化，从中可以看到，大约在  $500\mu s$  后波速呈现有规律的振荡，平均波速在  $1550 m/s$ ，压力分布可以达到稳定，峰值和理论峰值接近。图 8.3.c 给出温度分布随时间演变情况，可以看到温度收敛到  $T = 2600 K$  附近。最后在图 8.3.d 中给出了最终时刻的组分分布。

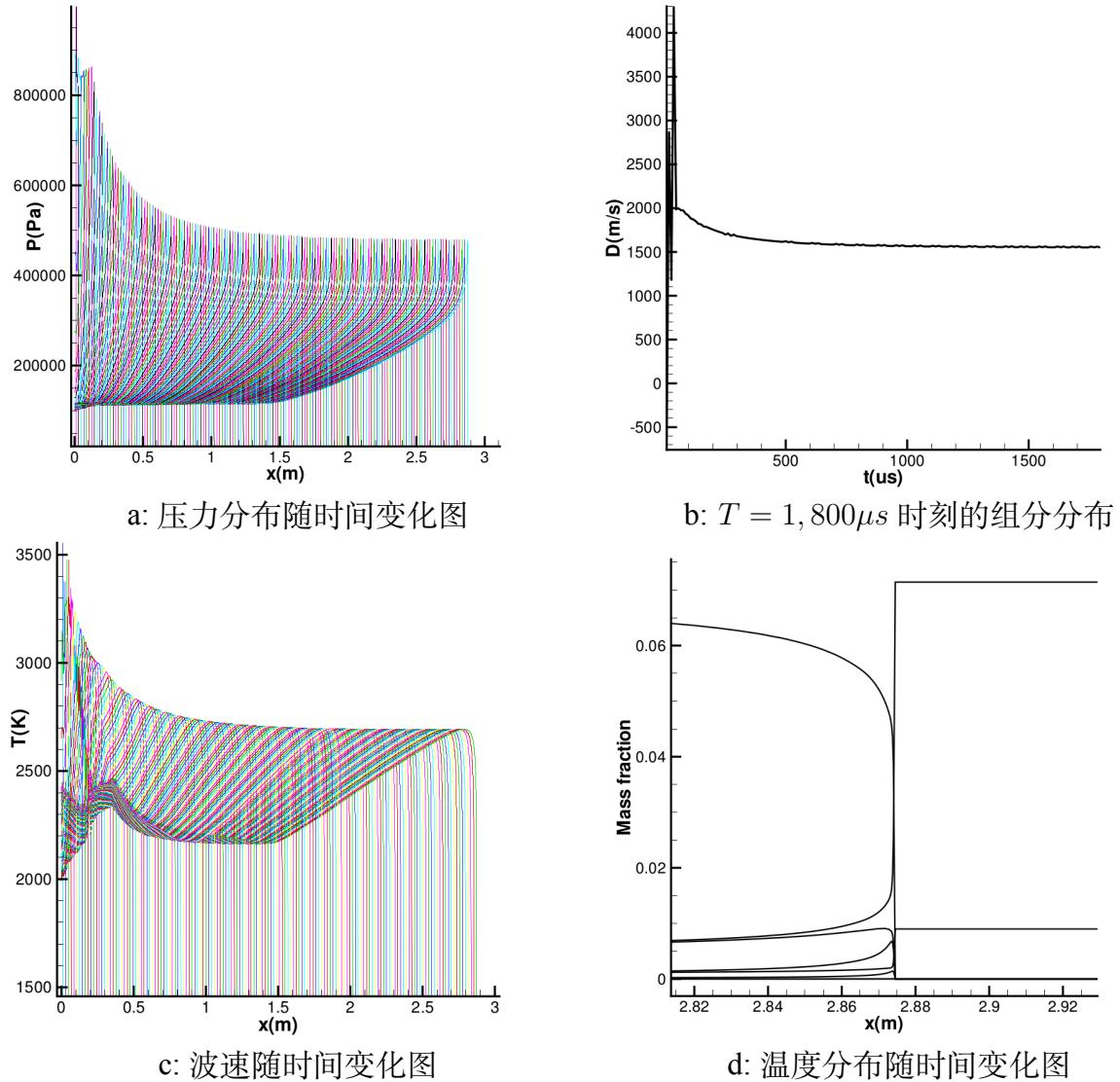
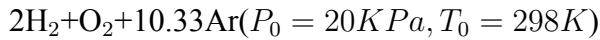

 图 8.4  $2\text{H}_2+\text{O}_2+10.33\text{Ar}$  算例计算结果

Figure 8.4 Numerical results of Example 8.4

**Example 8.4.**


在文献 [305] 中给出了该条件下的实验结果，平均实验波速为  $1557\text{m/s}$ ，通过 C-J 理论得出的参考波速为  $1548\text{ms}$ 。我们采用  $[0, 3\text{m}]$  的计算区域和  $N = 1,2000$  的网格量，计算时间为  $T = 1800\mu s$ 。图 8.4.a、图 8.4.b 和图 8.4.c 分别给出压力，波速和温度分布随时间的发展，可以看出，计算时间少于  $1500\mu s$  时并不能达到收敛的结果，最后的计算波速收敛在  $1551\text{m/s}$  和实验值及理论值都极为接近。最大压力值收敛在  $450\text{KPa}$ ，温度收敛在  $2700\text{K}$ 。在图 8.4.d 中我们给出最终时刻的组分的分布。

最后将以上的四种计算条件下的计算波速、实验波速和理论波速，以及计算所得的最大压力和理论最大压力进行对比，并汇总在表 8.3 中。

从以上算例间的对比可以得出如下规律：1) 爆轰波的确存在如引言 (1.4.3.1) 中所描述的一维不稳定性，这种不稳定性会造成爆轰波的压力和波速在传播方向上脉动振荡，算例表明，随着稀释剂的增加，这种不稳定会明显减弱；2) 随着稀释剂的增加，爆轰波波速同样呈现出减小的规律。

**表 8.3 不同条件下理论值、计算值和实验值对比**

**Table 8.3 The theoretical, computational and experiment detonation speeds in different conditions**

组分	2H <sub>2</sub> +O <sub>2</sub>	2H <sub>2</sub> +O <sub>2</sub> +Ar	2H <sub>2</sub> +O <sub>2</sub> +7Ar	2H <sub>2</sub> +O <sub>2</sub> +10.33Ar
压强 KPa	20	16	6.67	20
温度 K	296	298	298	298
计算波速 1 m/s(时刻 ms)	2740(300)	2173(300)	1575(400)	1654(300)
计算波速 2 m/s(时刻 ms)	2744(700)	2180(1200)	1550(1800)	1551(1800)
参考波速 m/s	2750	2240	1618	1548
实验波速 m/s	2769	2127.7	1550	1557
计算最大压力 KPa	600-700	440	157	480
参考最大压力 KPa	610	477	160	500

### Example 8.5.

该算例中选取和上个算例 8.4 相同的计算条件在网格  $N = 12000$  和计算时间  $T = 1200\mu s$  下，对本文发展的方法和直接 WENO 方法进行比较。图 8.5 分别给出压力、波速变化和 O<sub>2</sub> 组分和稀释剂 Ar 的对比结果，可以看到最终爆轰波速收敛到了相同的结果，压力峰值也几乎相同，由此也验证了新方法求解化学反应的有效性。从 O<sub>2</sub> 组分分布放大图可以看到，传统高精度方法存在间断前后的振荡，甚至出现组分的负值，而应用了新的方法，计算结果中并无此类现象出现。然后，我们研究稀释剂 Ar 的变化，该组分并不在反应中求解，而是通过

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

求得。由于稀释剂并不参加化学反应，理论上应该不存在变化，然而传统格式的数值振荡和源项误差等原因会造成稀释剂有较大变化。图 8.5.d 中给出的 Ar 的组分分布显示，即使在如此精细的网格下，传统方法仍产生了约 1.5% 左右的误差。而新方法中 Ar 的最大误差不足  $10^{-6}$ ，很好的保持了组分的守恒。

### Example 8.6.

在通常的计算中，尤其在高维度问题的计算中，能采用的网格尺寸会远大于上面计算用到的网格尺寸，因此在这里我们验证在稀疏网格下新方法的效果。图 8.6 给出不同

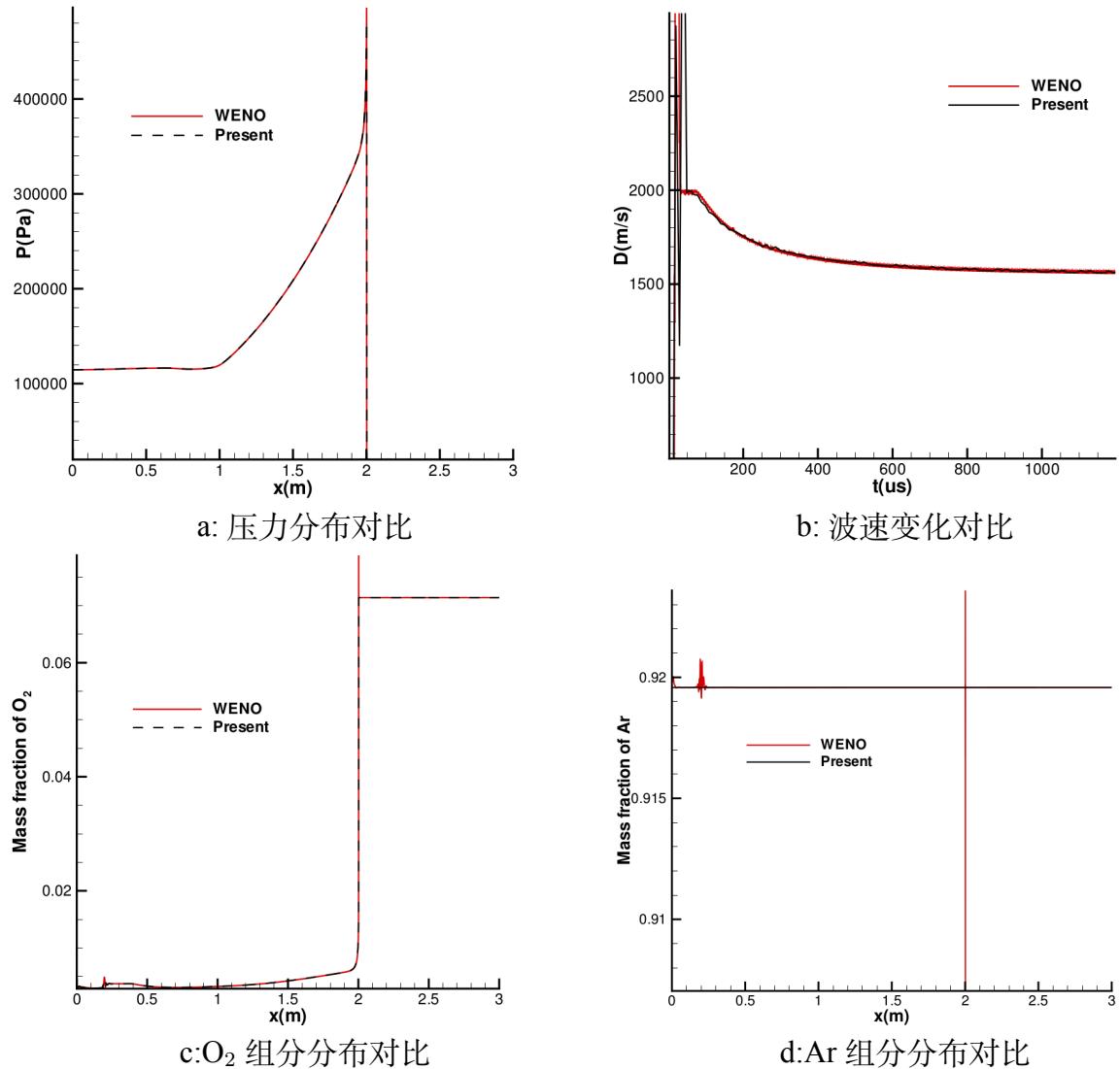
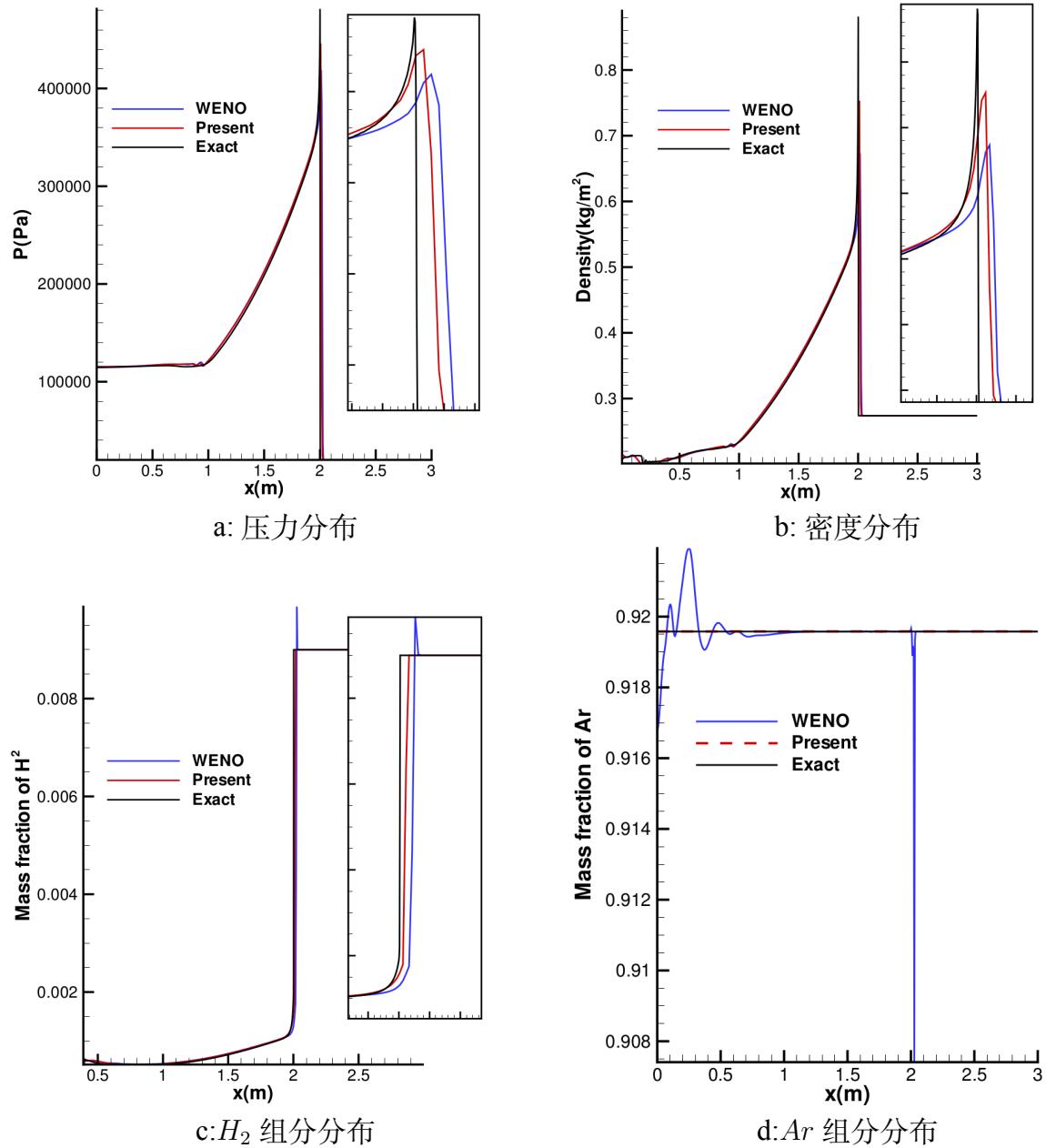


图 8.5 算例 8.5 计算结果

Figure 8.5 Numerical results of Example 8.5

图 8.6 稀疏网格下不同方法计算结果对比,  $N = 600$ Figure 8.6 Numerical results of Example 8.6  $N = 600$ 

方法在  $N = 600$  网格下计算结果对比, 参考解为  $N = 6000$  网格下已经测试过网格收敛的结果。可以看到, 新方法比传统方法具有好的精度效果。

### Example 8.7.

在本章的最后我们计算一个包含胞格结构的简单的二维爆轰算例。

预混爆轰的一个重要的特征是其内在不稳定性, 这种不稳定性会导致爆轰波的三维

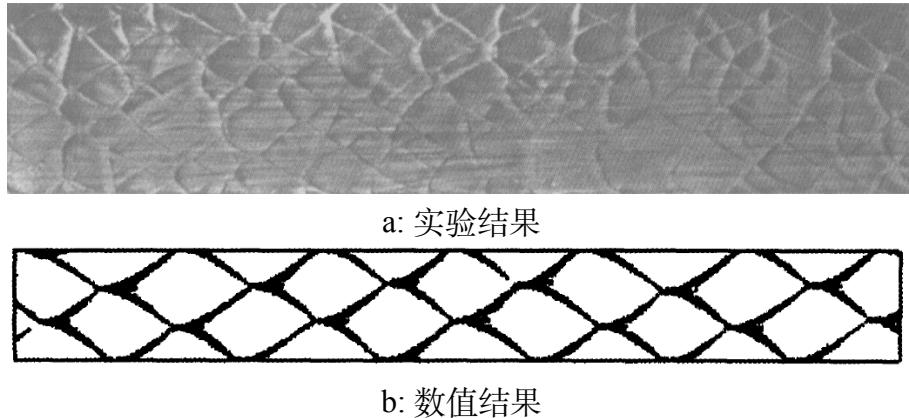
图 8.7  $2\text{H}_2+\text{O}_2+\text{Ar}$  爆轰实验结果和数值结果 [180]

Figure 8.7 The experiment and numerical results of Example 8.7 [180]

结构和非定常传播的性质，在前言 1.4.3.1 中有对胞格结构简单的介绍。胞格结构的长度尺寸和高度尺寸都和燃烧机理及反应物息息相关 [308]。然而，目前尚没有理论可以确定胞格尺寸和气体性质间的物理关系 [309]，各类爆轰胞格尺寸都需要通过实验测量。

爆轰波胞格结构的数值模拟从 20 世纪 80 年代后期才开始展开，数值模拟中的主要难点包括：1) 所需网格尺度过小导致计算量太大，2) 需要模拟爆轰波中的细微结构，因此对格式的精度要求同样很高。目前为止，数值模拟结果都无法和实验结果进行定量比较，计算得到的胞格尺度都偏小，对于胞格需要进一步定量化研究 [310]。

下面我们计算文献 [180] 给出的胞格结构研究算例，该算例采用和上节中第二个算例 (8.2) 中相似的条件，即  $2\text{H}_2+\text{O}_2+\text{Ar}(8\text{KPa}, 300\text{K})$ 。图8.7是在文献 [180] 中给出的该条件下的实验结果和计算结果。实验结果中胞格并不是十分规则，胞格的长度、长宽比分别为 8.2cm 和 0.58。文 [180] 中选取的计算区域为一条宽度为 1cm 的长管，计算方法类似于本文中的传统方法，空间采用五阶 WENO 格式，时间采用二阶 Runge-Kutta 格式，宽度方向的网格量为 125，计算得到的胞格宽度和长度分别为 7.0mm 和 12.5mm，远小于实验结果。

本文采用更稀疏的计算条件，计算区域采用  $6\text{cm} \times 80\text{cm}$  的长管，为了更快的激发爆轰波的不稳定性，在  $37.5\text{cm}$  处有一块很小的密度扰动区域，该区域密度为周围的两倍，其它条件不变。本文计算采用  $90 \times 1200$  的网格，图 8.8 给出压力最大值点即三波点的运动轨迹，可以看到，采用新方法能清晰的捕捉到胞格结构。和实验相似，数值结果中的胞格同样不规则，平均长度为 8.7cm，平均长宽比为 0.5，和实验结果更为接近。

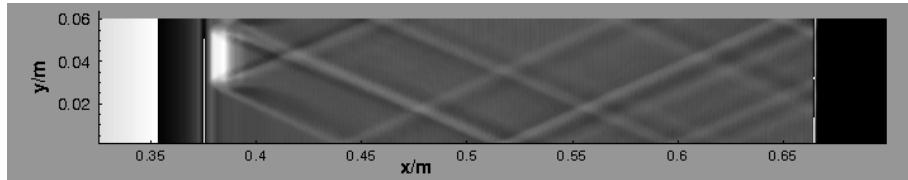
图 8.8  $2\text{H}_2+\text{O}_2+\text{Ar}$  爆轰新方法的数值结果

Figure 8.8 Numerical result with the new method of Example 8.7

#### 8.4 小结

本章拓展了 DIP 方法在基元反应模型的爆轰波数值模拟中的应用。算例结果表明：新方法可以避免传统方法中的组分曲线的振荡，保证组分的守恒性；在稀疏网格下能较传统方法更准确的计算爆轰波。最后我们将新方法应用在爆轰波胞格结构计算中，可以看到，即便采用了很稀疏的网格，也能较准确的捕捉出胞格的特征量，如胞格平均长度和胞格长宽比等。

## 第九章 结论和展望

本文针对于可压缩流动中的两类强间断—激波和界面，构造了对应的高分辨率求解方法，并研究了同时存在激波和化学反应（耗散界面）的爆轰波，通过新方法解决了其中面临的一些求解难点。

本文的主要工作总结如下：

- 1) 针对传统的 WENO 格式在连接光滑区和间断区的过渡点精度不足的问题，我们提出了多步加权的思想，并构造了五阶多步加权 WENO 格式。新格式结合了 Henrick 映射函数、WENO-Z 格式和多步加权构造方法，最大的优点是提高了 WENO 格式在激波附近区域的精度。
- 2) 本文结合有限紧致格式比较了现存的大量识别方法。研究表明：现有的识别方法中，多数都含有人为参数，限制了格式的使用范围，而 Shen 和 Zha 提出的基于模板光滑因子(整体/局部关系)的 SZ 识别方法不含有人为参数，因而能更准确识别出各种间断类型。发展高精度、无问题相关参数的激波判别方法是提高杂交格式稳定性和计算精度的重要途径。
- 3) 对比于流体力学方程，理想磁流体方程具有非严格双曲特性，含有更复杂的波系、特征系统和流场结构。本文结合了低耗散的 E-CUSP 格式、高精度激波判别方法及有限紧致格式思想，发展了理想磁流体方程的求解方法，数值算例验证了所发展方法的鲁棒性、高精度、低耗散性能。
- 4) 针对于传统界面方法难以求解超过三相物质的多相界面和存在界面厚度的耗散界面问题，本文构造了基于 Lagrangian 粒子方法的双信息保存 (DIP) 方法。在该方法中，我们引入两类携带有界面对流方程输运值的信息点，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。
- 5) 由于化学反应流动方程求解中经常会遇到时间刚性问题，本文基于数值摄动的思想，构造了求解 ODE 方程的高精度、稳定且具有显式形式的数值摄动 (NP) 格式。
- 6) 在刚性化学反应流动方程的数值求解中，可能存在由于刚性问题而导致的非物理爆轰波结果。本文发展了新型的方程分裂方法，将反应 Euler 方程分裂成 Euler 方程、组分对流方程和反应方程三部分。在爆轰问题中，组分对流部分的数值耗散

对产生非物理的波速和结构有重要影响，我们将双信息保存方法应用于该方程的求解。数值算例表明，新方法有效避免了组分对流步的数值耗散引起的非物理现象，能较好地分辨爆轰波化学反应界面。

- 7) 在采用了基元反应模型的爆轰数值模拟中，不同组分的反应区长度存在巨大差距，想要完全求解所有组分异常困难，在网格不够精细的情况下，组分结果会存在过度的耗散和数值振荡。本文将新的分裂方法和 DIP 方法应用于基元反应界面捕捉中，得到了更准确和稳定的计算结果。

尽管已有众多的数值算例验证了所发展的方法有效性，但作为新的方法，仍有许多方面值得进一步的去研究，包括：发展高效的多组分反应的数值摄动（NP）算法；双信息保存（DIP）方法中的高精度插值方法；三维反应流动中的应用以及湍流燃烧等研究工作。

## Appendix A 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
        z(i, j) = z(i, j)
    ENDDO
ENDDO
Np = (Nx + 1) * (Ny + 1)      ! 粒子点总数可能变化
DO i = 0, Nx
    DO j = 0, Ny
        n = i + j * Nx
        ip(n) = i
        jp(n) = j          ! 粒子点初始化
        Xp(n) = 0
        Yp(n) = 0
        zp(n) = 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
            Mrkp(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
        sx = sign(X(i, j)), sy = sign(Y(i, j))
        u(i, j) = (1 - |X|)u(i, j) + |X|u(i + sx, j)      ! 插值单元点速度
        v(i, j) = (1 - |Y|)v(i, j) + |Y|v(i, j + sy)
        Lx = X(i, j) + u(i, j)Δt/Δx
        Ly = Y(i, j) + v(i, j)Δt/Δy                      ! 临时相对坐标变化
        M = i + floor(Lx + 0.5),
        N = j + floor(Ly + 0.5).                          ! 新的所在单元和相对坐标
        X(i, j) = Lx - floor(Lx + 0.5)
        Y(i, j) = Ly - floor(Ly + 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)
    z'(M, N) = 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
     $\bar{z}'(M, N) = [\bar{z}(i, j) + \text{Mrk}(M, N)\bar{z}'(M, N)]/[\text{Mrk}(M, N) + 1]$ 
     $\text{Mrk}(M, N) = \text{Mrk}(M, N) + 1$ 
END DO
END DO

```

### 3. 粒子点的运动追踪

```

DO  $n = 0, N_p$ 
     $s_x = \text{sign}(X_p(n)), s_y = \text{sign}(Y_p(n))$ 
     $\bar{u}_p(n) = (1 - |X_p|)u(ip, jp) + |X_p|u(ip + s_x, jp)$       ! 插值粒子点速度
     $\bar{v}_p(n) = (1 - |Y_p|)v(ip, jp) + |Y_p|v(ip, jp + s_y)$ 

     $L_x = X_p(n) + \bar{u}_p(n)\Delta t/\Delta x$                       ! 临时相对坐标变化
     $L_y = Y_p(n) + \bar{v}_p(n)\Delta t/\Delta y$ 

     $ip(n) = ip(n) + \text{floor}(L_x + 0.5)$ 
     $jp(n) = jp(n) + \text{floor}(L_y + 0.5)$           ! 新的所在单元和相对坐标
     $X_p(n) = L_x - \text{floor}(L_x + 0.5)$ 
     $Y_p(n) = L_y - \text{floor}(L_y + 0.5)$ 

```

### 4. 粒子点修正单元点

```

IF  $\text{Mrk}_p(ip, jp) = 0$  THEN
     $X'(ip, jp) = X_p(n)$ 
     $Y'(ip, jp) = Y_p(n)$ 
     $\bar{z}'(ip, jp) = \bar{z}_p(n)$ 
ELSE
    IF  $\bar{z}_p(n) < \bar{z}'(ip, jp)$  THEN
         $X'(ip, jp) = X_p(n)$ 
         $Y'(ip, jp) = Y_p(n)$           ! 多个粒子点, 选取  $z$  值小的点
         $\bar{z}'(ip, jp) = \bar{z}_p(n)$ 
    ENDIF
ENDIF
 $X'(ip, jp) = [X_p(n) + \text{Mrk}_p(ip, jp)X'(ip, jp)]/[\text{Mrk}_p(ip, jp) + 1]$ 
 $Y'(ip, jp) = [Y_p(n) + \text{Mrk}_p(ip, jp)Y'(ip, jp)]/[\text{Mrk}_p(ip, jp) + 1]$   ! 多个粒子点, 进行平均
 $\bar{z}'(ip, jp) = [\bar{z}_p(n) + \text{Mrk}_p(ip, jp)\bar{z}'(ip, jp)]/[\text{Mrk}_p(ip, jp) + 1]$ 
 $\text{Mrk}_p(ip, jp) = \text{Mrk}_p(ip, jp) + 1$ 
END DO
END DO

END IF

```

### 5. 在空单元生成单元点

```

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

```





## Appendix B 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 [291]，其中第  $i$  组分气体热力学参数具体表达式为：

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

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

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

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 B.1 氢氧爆轰组分拟合参数

Table B.1 Fitting coefficients in the H<sub>2</sub> and O<sub>2</sub> detonation

组份	a1	a2	a3	a4	a5	a6	a7
H <sub>2</sub>							
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
O <sub>2</sub>							
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
HO <sub>2</sub>							
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
H <sub>2</sub> O							
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
CH <sub>3</sub>							
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
CH <sub>4</sub>							
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
CO <sub>2</sub>							
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
CH <sub>2</sub> O							
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
N <sub>2</sub>							
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] Bernhard Riemann. *Über die Fortpflanzung ebener Luftwellen von endlicher Schwingungsweite*. Verlag der Dieterichschen Buchhandlung, 1860.
- [2] Joel Smoller. *Shock waves and reaction—diffusion equations*. New York: Springer-Verlag, 1994.
- [3] 应隆安, 滕振寰. 双曲型守恒律方程及其差分方法. 北京: 科学出版社, 1991.
- [4] Gino Moretti. Computation of flows with shocks. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 19(1):313–337, 1987.
- [5] Stanley Osher. Shock modelling in transonic and supersonic flow. *Advanced in Computational Transonics*, 4:607–643, 1985.
- [6] Holger Babinsky and John K Harvey. *Shock wave-boundary-layer interactions*, volume 32. Cambridge University Press, 2011.
- [7] A Zheltovodov. Shock waves/turbulent boundary-layer interactions-fundamental studies and applications. In *Fluid Dynamics Conference*, page 1977, 1996.
- [8] Nathaniel Hildebrand, Anubhav Dwivedi, Prakash Shrestha, Joseph W Nichols, Mihailo R Jovanovic, and Graham V Candler. Global stability analysis of oblique shock/boundary layer interactions at mach 5.92. In *APS Division of Fluid Dynamics Meeting Abstracts*, 2016.
- [9] Joseph W Nichols, Johan Larsson, Matteo Bernardini, et al. Stability and modal analysis of shock/boundary layer interactions. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, pages 1–18, 2016.
- [10] M Anderson, Peter Vorobieff, CR Truman, C Corbin, G Kuehner, P Wayne, J Conroy, R White, and S Kumar. An experimental and numerical study of shock interaction with a gas column seeded with droplets. *Shock Waves*, 25(2):107–125, 2015.
- [11] Ozgur Tumuklu, Deborah A Levin, and Joanna M Austin. Shock-shock interactions for a double wedge configuration in different gases. In *53rd AIAA Aerospace Sciences Meeting*, page 1520, 2015.
- [12] Elizabeth C Merritt, Auna L Moser, Scott C Hsu, John Loverich, and Mark Gilmore. Experimental characterization of the stagnation layer between two obliquely merging supersonic plasma jets. *Physical review letters*, 111(8):085003, 2013.

- [13] A Hadjadj, Y Perrot, and S Verma. Numerical study of shock/boundary layer interaction in supersonic overexpanded nozzles. *Aerospace Science and Technology*, 42:158–168, 2015.
- [14] Guang Yang, Yufeng Yao, Jian Fang, Tian Gan, and Lipeng Lu. Large-eddy simulation of shock-wave/turbulent boundary layer interaction and its control using sparkjet. In *International Journal of Modern Physics: Conference Series*, volume 42, page 1660186. World Scientific, 2016.
- [15] GX Xiang, C Wang, HH Teng, and ZL Jiang. Investigations of three-dimensional shock/shock interactions over symmetrical intersecting wedges. *AIAA Journal*, 54(1):1472–1481, 2016.
- [16] 傅德薰, 马延文. 计算流体力学. 高等教育出版社, 2002.
- [17] Jean-Pierre Cocchi and Richard Saurel. A riemann problem based method for the resolution of compressible multimaterial flows. *Journal of Computational Physics*, 137(2):265–298, 1997.
- [18] Eleuterio F Toro, Michael Spruce, and William Speares. Restoration of the contact surface in the hll-riemann solver. *Shock waves*, 4(1):25–34, 1994.
- [19] VA Andronov, SM Bakhra, EE Meshkov, VN Mokhov, VV Nikiforov, AV Pevnitskii, and AI Tolshmyakov. Turbulent mixing at contact surface accelerated by shock waves. *Sov. Phys. JETP*, 44(2):424–427, 1976.
- [20] Christopher E Brennen. *Fundamentals of multiphase flow*. Cambridge university press, 2005.
- [21] Frederick G Hammitt. *Cavitation and multiphases flow phenomena*. McGraw-Hill, 1980.
- [22] F Ronald Young. *Cavitation*. World Scientific, 1999.
- [23] Anton Bergant, Angus R Simpson, and Arris S Tijsseling. Water hammer with column separation: A historical review. *Journal of fluids and structures*, 22(2):135–171, 2006.
- [24] Bo Leckner. Fluidized bed combustion: mixing and pollutant limitation. *Progress in Energy and Combustion Science*, 24(1):31–61, 1998.
- [25] Nikolay Ivanov Kolev. *Multiphase flow dynamics: Fundamentals*. Springer, 2005.
- [26] V Rupert. Shock-interface interaction: current research on the richtmyer-meshkov problem. In *Shock Waves*, pages 83–94. Springer, 1992.
- [27] TG Liu, BC Khoo, and KS Yeo. Ghost fluid method for strong shock impacting on material interface. *Journal of Computational Physics*, 190(2):651–681, 2003.

- [28] EE Meshkov. Instability of the interface of two gases accelerated by a shock wave. *Fluid Dynamics*, 4(5):101–104, 1969.
- [29] Irvin Glassman, Richard A Yetter, and Nick G Glumac. *Combustion*. Academic press, 2014.
- [30] John HS Lee. *The detonation phenomenon*, volume 2. Cambridge University Press Cambridge, 2008.
- [31] Wildon Fickett and William C Davis. *Detonation: theory and experiment*. Courier Corporation, 2012.
- [32] Thomas Bussing and George Pappas. Pulse detonation engine theory and concepts. *Developments in high-speed-vehicle propulsion systems*, 165:421–472, 1996.
- [33] T Bussing and George Pappas. An introduction to pulse detonation engines. In *32nd Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, page 263, 1994.
- [34] A No Dremin, SD Savrov, V So Trofimov, and KK Shvedov. Detonation waves in condensed media. Technical report, DTIC Document, 1972.
- [35] Roger Chéret. *Detonation of condensed explosives*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [36] 童秉纲, 孔祥言, 邓国华等. 气体动力学. 高等教育出版社, 1990.
- [37] Jeffrey P Freidberg. *Ideal magnetohydrodynamics*. Plenum Press, New York, NY, 1987.
- [38] Josef Mikeš, Sergey Stepanov, and Marek Jukl. The pre-maxwell equations. In *Geometric Methods in Physics*, pages 377–381. Springer, 2013.
- [39] Stephen Schechter and Michael Shearer. Undercompressive shocks for nonstrictly hyperbolic conservation laws. *Journal of Dynamics and Differential Equations*, 3(2):199–271, 1991.
- [40] Henri-Marie Damevin and Klaus Hoffmann. Development of a modified runge-kutta scheme with tvd limiters for ideal three-dimensional magnetogasdynamics. In *32nd AIAA Plasmadynamics and Lasers Conference*, page 2739, 2001.
- [41] Philip L Roe and Dinshaw S Balsara. Notes on the eigensystem of magnetohydrodynamics. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 56(1):57–67, 1996.
- [42] John David Anderson Jr. *Fundamentals of aerodynamics*. Tata McGraw-Hill Education, 2010.
- [43] Eberhard Hopf. The partial differential equation  $ut + uux = \mu xx$ . *Communications on Pure and Applied mathematics*, 3(3):201–230, 1950.

- [44] Peter D Lax. Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation. *Communications on pure and applied mathematics*, 7(1):159–193, 1954.
- [45] Peter D Lax. Hyperbolic systems of conservation laws ii. *Communications on pure and applied mathematics*, 10(4):537–566, 1957.
- [46] Olga Arsen'evna Oleinik. Discontinuous solutions of non-linear differential equations. *Uspekhi Matematicheskikh Nauk*, 12(3):3–73, 1957.
- [47] Olga Arsenévnna Oleinik. 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):169–176, 1957.
- [48] Olga Arsen'evna Oleinik. Uniqueness and stability of the generalized solution of the cauchy problem for a quasi-linear equation. *Uspekhi Matematicheskikh Nauk*, 14(2):165–170, 1959.
- [49] 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.
- [50] 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.
- [51] Constantine M Dafermos. Generalized characteristics and the structure of solutions of hyperbolic conservation laws. Technical report, DTIC Document, 1976.
- [52] James Glimm. Solutions in the large for nonlinear hyperbolic systems of equations. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 18(4):697–715, 1965.
- [53] 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.
- [54] 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.
- [55] James Glimm and Peter D Lax. Decay of solutions of systems of nonlinear hyperbolic conservation laws. 1970.
- [56] T-P Liu and Joel A Smoller. On the vacuum state for the isentropic gas dynamics equations. *Advances in Applied Mathematics*, 1(4):345–359, 1980.
- [57] Luc Tartar. Compensated compactness and applications to partial differential equations. In *Nonlinear analysis and mechanics: Heriot-Watt symposium*, volume 4, pages 136–212, 1979.

- [58] Luc Tartar. The compensated compactness method applied to systems of conservation laws. In *Systems of nonlinear partial differential equations*, pages 263–285. Springer, 1983.
- [59] Ronald J DiPerna. Convergence of the viscosity method for isentropic gas dynamics. *Communications in mathematical physics*, 91(1):1–30, 1983.
- [60] Xia Xi Ding, Gui Qiang Chen, and Pei Zhu Luo. Convergence of the lax-friedrichs scheme for isentropic gas-dynamics. 1. *Acta Mathematica Scientia*, 5(4):415–432, 1985.
- [61] Gui Qiang Chen. Convergence of the lax-friedrichs scheme for isentropic gas dynamics (iii). *Acta Math. Sci*, 6(1):75–120, 1986.
- [62] Pierre-Louis Lions, Benoît Perthame, and Eitan Tadmor. Kinetic formulation of the isentropic gas dynamics and systems. *Communications in mathematical physics*, 163(2):415–431, 1994.
- [63] Pierre-Louis Lions, Benoît Perthame, and Panagiotis E Souganidis. 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):599–638, 1996.
- [64] Wancheng Sheng. Two-dimensional riemann problem for scalar conservation laws. *Journal of Differential Equations*, 183(1):239–261, 2002.
- [65] De Chun Tan and Tong Zhang. Two-dimensional riemann problem for a hyperbolic system of nonlinear conservation laws: I. four-j cases. *Journal of differential equations*, 111(2):203–254, 1994.
- [66] Yicheng Pang, Shaohong Cai, and Yuanying Zhao. Global solutions to the two-dimensional riemann problem for a system of conservation laws. *Journal of Mathematical Physics*, 57(6):061501, 2016.
- [67] IM Gelfand. Some problems in the theory of quasilinear equations. *Amer. Math. Soc. Transl*, 29(2):295–381, 1963.
- [68] B. Wendroff P.D.Lax. Hyperbolic systems of conservation laws ii. *Comm. Pure Appl. Math.*, 13:537–566, 1960.
- [69] P.D.Lax. Shock waves and entropy, in contributions to nonlinear functional analysis (e. a. zarantonello, ed.). *Academic Press, New York*, pages 603–634, 1971.

- [70] Tong Zhang and Yu Xi Zheng. Conjecture on the structure of solutions of the riemann problem for two-dimensional gas dynamics systems. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 21(3):593–630, 1990.
- [71] Carsten W Schulz-Rinne. Classification of the riemann problem for two-dimensional gas dynamics. *SIAM journal on mathematical analysis*, 24(1):76–88, 1993.
- [72] Tung Chang, Gui-Qiang Chen, and Shuli Yang. On the 2-d riemann problem for the compressible euler equations. i. interaction of shocks and rarefaction waves. *Discrete and Continuous Dynamical Systems*, 1:555–584, 1995.
- [73] Tung Chang, Gui-Qiang Chen, and Shuli Yang. On the 2-d riemann problem for the compressible euler equations ii. interaction of contact discontinuities. *Discrete and Continuous Dynamical Systems*, 6(2):419–430, 2000.
- [74] Peter D Lax and Xu-Dong Liu. Solution of two-dimensional riemann problems of gas dynamics by positive schemes. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 19(2):319–340, 1998.
- [75] 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.
- [76] Lewis Fry Richardson. *Weather prediction by numerical process*. Cambridge University Press, 2007.
- [77] Richard Courant, Kurt Friedrichs, and Hans Lewy. Über die partiellen differenzengleichungen der mathematischen physik. *Mathematische annalen*, 100(1):32–74, 1928.
- [78] Sergei Konstantinovich Godunov. A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics. *Matematicheskii Sbornik*, 89(3):271–306, 1959.
- [79] Peter Lax and Burton Wendroff. Systems of conservation laws. *Communications on Pure and Applied mathematics*, 13(2):217–237, 1960.
- [80] Ephraim L Rubin and Samuel Z Burstein. Difference methods for the inviscid and viscous equations of a compressible gas. *Journal of Computational Physics*, 2(2):178–196, 1967.
- [81] RW Maccormack. The effect of viscosity in hypervelocity impact cratering. *AIAA Paper No. 69-354*, 1969.
- [82] VV Rusanov. On difference schemes of third order accuracy for nonlinear hyperbolic systems. *Journal of Computational Physics*, 5(3):507–516, 1970.
- [83] Samuel Z Burstein and Arthur A Mirin. Third order difference methods for hyperbolic equations. *Journal of Computational Physics*, 5(3):547–571, 1970.

- [84] Jay P Boris and David L Book. Flux-corrected transport. i. shasta, a fluid transport algorithm that works. *Journal of computational physics*, 11(1):38–69, 1973.
- [85] David L Book, Jay P Boris, and K Hain. Flux-corrected transport ii: Generalizations of the method. *Journal of Computational Physics*, 18(3):248–283, 1975.
- [86] Jay P Boris and DL Book. Flux-corrected transport. iii. minimal-error fct algorithms. *Journal of Computational Physics*, 20(4):397–431, 1976.
- [87] Steven T Zalesak. Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids. *Journal of computational physics*, 31(3):335–362, 1979.
- [88] Bram Van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme i. the quest of monotonicity. In *Proceedings of the Third International Conference on Numerical Methods in Fluid Mechanics*, pages 163–168. Springer, 1973.
- [89] Bram Van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. ii. monotonicity and conservation combined in a second-order scheme. *Journal of computational physics*, 14(4):361–370, 1974.
- [90] Bram Van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. iv. a new approach to numerical convection. *Journal of computational physics*, 23(3):276–299, 1977.
- [91] Bram Van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. v. a second-order sequel to godunov’s method. *Journal of computational Physics*, 32(1):101–136, 1979.
- [92] Amiram Harten, Peter D Lax, and Bram Van Leer. On upstream differencing and godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. In *Upwind and High-Resolution Schemes*, pages 53–79. Springer, 1997.
- [93] Peter D Lax. *Decay of solutions of systems of nonlinear hyperbolic conservation laws*, volume 101. American Mathematical Soc., 1970.
- [94] Ami Harten. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of computational physics*, 49(3):357–393, 1983.
- [95] Jonathan B Goodman and Randall J LeVeque. On the accuracy of stable schemes for 2d scalar conservation laws. *Mathematics of computation*, pages 15–21, 1985.
- [96] Ami Harten, Stanley Osher, Björn Engquist, and Sukumar R Chakravarthy. Some results on uniformly high-order accurate essentially nonoscillatory schemes. *Applied Numerical Mathematics*, 2(3-5):347–377, 1986.

- [97] Ami Harten, Bjorn Engquist, Stanley Osher, and Sukumar R Chakravarthy. Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes, iii. *Journal of computational physics*, 71(2):231–303, 1987.
- [98] Xu-Dong Liu, Stanley Osher, and Tony Chan. Weighted essentially non-oscillatory schemes. *Journal of computational physics*, 115(1):200–212, 1994.
- [99] Chi-Wang Shu and Stanley Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. *Journal of Computational Physics*, 77(2):439–471, 1988.
- [100] Andrew K Henrick, Tariq D Aslam, and Joseph M Powers. Mapped weighted essentially non-oscillatory schemes: achieving optimal order near critical points. *Journal of Computational Physics*, 207(2):542–567, 2005.
- [101] Dinshaw S Balsara and Chi-Wang Shu. Monotonicity preserving weighted essentially non-oscillatory schemes with increasingly high order of accuracy. *Journal of Computational Physics*, 160(2):405–452, 2000.
- [102] GA Gerolymos, D Sénéchal, and I Vallet. Very-high-order weno schemes. *Journal of Computational Physics*, 228(23):8481–8524, 2009.
- [103] Doron Levy, Gabriella Puppo, and Giovanni Russo. Compact central weno schemes for multidimensional conservation laws. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 22(2):656–672, 2000.
- [104] M Pino Martín, Ellen M Taylor, Minwei Wu, and V Gregory Weirs. A bandwidth-optimized weno scheme for the effective direct numerical simulation of compressible turbulence. *Journal of Computational Physics*, 220(1):270–289, 2006.
- [105] Shuhai Zhang, Shufen Jiang, and Chi-Wang Shu. Development of nonlinear weighted compact schemes with increasingly higher order accuracy. *Journal of Computational Physics*, 227(15):7294–7321, 2008.
- [106] Eric Johnsen, Johan Larsson, Ankit V Bhagatwala, et al. Assessment of high-resolution methods for numerical simulations of compressible turbulence with shock waves. *Journal of Computational Physics*, 229(4):1213–1237, 2010.
- [107] Sanjiva K Lele. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *Journal of computational physics*, 103(1):16–42, 1992.
- [108] Li Jiang, Hua Shan, and Chaoqun Liu. Weighted compact scheme for shock capturing. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 15(2):147–155, 2001.

- [109] Debojyoti Ghosh and James D Baeder. Weighted non-linear compact schemes for the direct numerical simulation of compressible, turbulent flows. *Journal of Scientific Computing*, 61(1):61–89, 2014.
- [110] Xiaogang Deng and Hiroshi Maekawa. Compact high-order accurate nonlinear schemes. *Journal of Computational Physics*, 130(1):77–91, 1997.
- [111] Jun Peng and Yiqing Shen. Improvement of weighted compact scheme with multi-step strategy for supersonic compressible flow. *Computers & Fluids*, 115:243–255, 2015.
- [112] Yiqing Shen and Gecheng Zha. Improvement of weighted essentially non-oscillatory schemes near discontinuities. *Computers & Fluids*, 96:1–9, 2014.
- [113] Yiqing Shen, Li Liu, and Yan Yang. Multistep weighted essentially non-oscillatory scheme. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 75(4):231–249, 2014.
- [114] David J Hill and Dale I Pullin. Hybrid tuned center-difference-weno method for large eddy simulations in the presence of strong shocks. *Journal of Computational Physics*, 194(2):435–450, 2004.
- [115] Dehee Kim and Jang Hyuk Kwon. 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):554–583, 2005.
- [116] Sergio Pirozzoli. Conservative hybrid compact-weno schemes for shock-turbulence interaction. *Journal of Computational Physics*, 178(1):81–117, 2002.
- [117] Yu-Xin Ren and Hanxin Zhang. A characteristic-wise hybrid compact-weno scheme for solving hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 192(2):365–386, 2003.
- [118] Bruno Costa and Wai Sun Don. Multi-domain hybrid spectral-weno methods for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 224(2):970–991, 2007.
- [119] Yiqing Shen and Gecheng Zha. Generalized finite compact difference scheme for shock/complex flowfield interaction. *Journal of Computational Physics*, 230(12):4419–4436, 2011.
- [120] Philip L Roe. Approximate riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes. *Journal of computational physics*, 43(2):357–372, 1981.
- [121] Stanley Osher and Fred Solomon. Upwind difference schemes for hyperbolic systems of conservation laws. *Mathematics of computation*, 38(158):339–374, 1982.

- [122] Amiram Harten, Peter D Lax, and Bram van Leer. On upstream differencing and godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. *SIAM Review*, 25(1):35, 1983.
- [123] TG Liu, BC Khoo, and CW Wang. The ghost fluid method for compressible gas–water simulation. *Journal of Computational Physics*, 204(1):193–221, 2005.
- [124] Joseph L Steger and RF Warming. Flux vector splitting of the inviscid gasdynamic equations with application to finite-difference methods. *Journal of computational physics*, 40(2):263–293, 1981.
- [125] B van Leer. 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., pages 507–512, 1982.
- [126] Meng-Sing Liou and Christopher J Steffen. A new flux splitting scheme. *Journal of Computational physics*, 107(1):23–39, 1993.
- [127] Meng-Sing Liou. A sequel to ausm: Ausm+. *Journal of computational Physics*, 129(2):364–382, 1996.
- [128] Meng-Sing Liou. A sequel to ausm, part ii: Ausm+-up for all speeds. *Journal of Computational Physics*, 214(1):137–170, 2006.
- [129] Y Wada and MS Liou. An accurate and robust splitting scheme for shock and contact discontinuities, aiaa, 1994.
- [130] Kyu Hong Kim, Joon Ho Lee, and Oh Hyun Rho. An improvement of ausm schemes by introducing the pressure-based weight functions. *Computers & fluids*, 27(3):311–346, 1998.
- [131] Kyu Hong Kim, Chongam Kim, and Oh-Hyun Rho. Methods for the accurate computations of hypersonic flows: I. ausmpw+ scheme. *Journal of Computational Physics*, 174(1):38–80, 2001.
- [132] Ge-Cheng Zha. Low diffusion efficient upwind scheme. *AIAA journal*, 43(5):1137–1140, 2005.
- [133] G-C Zha and E Bilgen. Numerical solutions of euler equations by using a new flux vector splitting scheme. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 17(2):115–144, 1993.
- [134] Ge-Cheng Zha. Numerical tests of upwind scheme performance for entropy condition. *AIAA journal*, 37(8):1005–1007, 1999.

- [135] Gecheng Zha, Yiqing Shen, and Baoyuan Wang. Calculation of transonic flows using weno method with a low diffusion e-cusp upwind scheme. In *46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, page 745, 2008.
- [136] Preston C Hammer and Jack W Hollingsworth. Trapezoidal methods of approximating solutions of differential equations. *Mathematical Tables and Other Aids to Computation*, pages 92–96, 1955.
- [137] Chi-Wang Shu. Total-variation-diminishing time discretizations. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 9(6):1073–1084, 1988.
- [138] Yi-qing Shen, Ru-quan Wang, and Hong-zhi Liao. A fifth-order accurate weighted enn difference scheme and its applications. *Journal of Computational Mathematics*, pages 531–538, 2001.
- [139] Grétar Tryggvason, Bernard Bunner, Asghar Esmaeeli, et al. A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *Journal of Computational Physics*, 169(2):708–759, 2001.
- [140] Thomas Bonometti and Jacques Magnaudet. An interface-capturing method for incompressible two-phase flows. validation and application to bubble dynamics. *International Journal of Multiphase Flow*, 33(2):109–133, 2007.
- [141] Salih Ozen Unverdi and Grétar Tryggvason. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of computational physics*, 100(1):25–37, 1992.
- [142] FS De Sousa, N Mangiacavalli, LG Nonato, et al. A front-tracking/front-capturing method for the simulation of 3d multi-fluid flows with free surfaces. *Journal of Computational Physics*, 198(2):469–499, 2004.
- [143] Stéphane Popinet and Stéphane Zaleski. A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 30(6):775–793, 1999.
- [144] DJ Torres and JU Brackbill. The point-set method: front-tracking without connectivity. *Journal of Computational Physics*, 165(2):620–644, 2000.
- [145] Seungwon Shin and Damir Juric. Modeling three-dimensional multiphase flow using a level contour reconstruction method for front tracking without connectivity. *Journal of Computational Physics*, 180(2):427–470, 2002.
- [146] Francis H Harlow and J Eddie Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Physics of fluids*, 8(12):2182, 1965.

- [147] Jeremiah U Brackbill, Douglas B Kothe, and Hans M Ruppel. Flip: a low-dissipation, particle-in-cell method for fluid flow. *Computer Physics Communications*, 48(1):25–38, 1988.
- [148] Murilo F Tome and Sean McKee. Gensmac: A computational marker and cell method for free surface flows in general domains. *Journal of Computational Physics*, 110(1):171–186, 1994.
- [149] S McKee, MF Tomé, VG Ferreira, JA Cuminato, A Castelo, FS Sousa, and N Mangiacavacchi. The mac method. *Computers & Fluids*, 37(8):907–930, 2008.
- [150] MF Tomé, JA Cuminato, N Mangiacavacchi, S McKee, et al. Gensmac3d: a numerical method for solving unsteady three-dimensional free surface flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 37(7):747–796, 2001.
- [151] HY Yoon, IK Park, YJ Lee, and JJ Jeong. An unstructured smac algorithm for thermal non-equilibrium two-phase flows. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 36(1):16–24, 2009.
- [152] Stanley Osher and James A Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed: algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of computational physics*, 79(1):12–49, 1988.
- [153] Mark Sussman, Peter Smereka, and Stanley Osher. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *Journal of Computational physics*, 114(1):146–159, 1994.
- [154] James Albert Sethian. *Level set methods and fast marching methods: evolving interfaces in computational geometry, fluid mechanics, computer vision, and materials science*, volume 3. Cambridge university press, 1999.
- [155] Cyril W Hirt and Billy D Nichols. Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of computational physics*, 39(1):201–225, 1981.
- [156] David L Youngs. Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion. *Numerical methods for fluid dynamics*, 24(2):273–285, 1982.
- [157] Bruno Lafaurie, Carlo Nardone, Ruben Scardovelli, et al. Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with surfer. *Journal of Computational Physics*, 113(1):134–147, 1994.
- [158] Ruben Scardovelli and Stéphane Zaleski. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annual review of fluid mechanics*, 31(1):567–603, 1999.

- [159] Zhaorui Li, Farhad A Jaberi, and Tom IP Shih. 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):2271–2300, 2008.
- [160] Douglas Enright, Ronald Fedkiw, Joel Ferziger, and others Mitchell. A hybrid particle level set method for improved interface capturing. *Journal of Computational physics*, 183(1):83–116, 2002.
- [161] Douglas Enright, Frank Losasso, and Ronald Fedkiw. A fast and accurate semi-lagrangian particle level set method. *Computers & structures*, 83(6):479–490, 2005.
- [162] JS Huang and WW Webb. Diffuse interface in a critical fluid mixture. *The Journal of Chemical Physics*, 50(9):3677–3693, 1969.
- [163] D Jamet, O Lebaigue, N Coutris, and JM Delhaye. The second gradient method for the direct numerical simulation of liquid–vapor flows with phase change. *Journal of Computational Physics*, 169(2):624–651, 2001.
- [164] Joseph B Collins and Herbert Levine. Diffuse interface model of diffusion-limited crystal growth. *Physical Review B*, 31(9):6119, 1985.
- [165] DM Anderson and Geoffrey B McFadden. A diffuse-interface description of internal waves in a near-critical fluid. *Physics of Fluids*, 9(7):1870–1879, 1997.
- [166] Charles M Elliott and Zheng Songmu. On the cahn-hilliard equation. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 96(4):339–357, 1986.
- [167] Pengtao Yue, Chunfeng Zhou, and James J Feng. Sharp-interface limit of the cahn–hilliard model for moving contact lines. *Journal of Fluid Mechanics*, 645:279–294, 2010.
- [168] David Jacqmin. Calculation of two-phase navier–stokes flows using phase-field modeling. *Journal of Computational Physics*, 155(1):96–127, 1999.
- [169] Qiang Du, Chun Liu, and Xiaoqiang Wang. Retrieving topological information for phase field models. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 65(6):1913–1932, 2005.
- [170] Xiaoqiang Wang and Qiang Du. Modelling and simulations of multi-component lipid membranes and open membranes via diffuse interface approaches. *Journal of mathematical biology*, 56(3):347–371, 2008.
- [171] JU Brackbill, Douglas B Kothe, and Charles Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of computational physics*, 100(2):335–354, 1992.
- [172] Leonid K Antanovskii. A phase field model of capillarity. *Physics of fluids*, 7(4):747–753, 1995.

- [173] David Leonard Chapman. Vi. on the rate of explosion in gases. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 47(284):90–104, 1899.
- [174] Emile Jouguet. On the propagation of chemical reactions in gases. *J. de mathematiques Pures et Appliquees*, 1(347-425):2, 1905.
- [175] JB Zeldovich. To the theory of detonation propagation in gas systems. *Journal of experimental and theoretical physics*, 10(5):542–568, 1940.
- [176] Werner Döring. On detonation processes in gases. *Ann. Phys*, 43(421-436):9, 1943.
- [177] John Von Neuman. Theory of detonation waves. Technical report, DTIC Document, 1942.
- [178] JE Shepherd. Detonation in gases. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32(1):83–98, 2009.
- [179] James A Fay. Two-dimensional gaseous detonations: Velocity deficit. *The Physics of Fluids*, 2(3):283–289, 1959.
- [180] 王昌建, 徐胜利. 直管内胞格爆轰的基元反应数值研究. *爆炸與衝擊*, 25(5):405–416, 2005.
- [181] 姜宗林, 滕宏辉, 刘云峰. 气相爆轰物理的若干研究进展. *力学进展*, 42(2):129–140, 2012.
- [182] 张旭东, 范宝春, 潘振华等. 旋转爆轰自持机理的数值研究. *弹道学报*, 23(1):1–4, 2011.
- [183] Fedor A Bykovskii, Sergey A Zhdan, and Evgenii F Vedernikov. Continuous spin detonations. *Journal of Propulsion and Power*, 22(6):1204, 2006.
- [184] 潘振华, 范宝春, 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):709–715, 2014.
- [185] Habib N Najm, Peter S Wyckoff, and Omar M Knio. A semi-implicit numerical scheme for reacting flow: I. stiff chemistry. *Journal of Computational Physics*, 143(2):381–402, 1998.
- [186] MD Smooke, IK Puri, and K Seshadri. 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*, volume 21, pages 1783–1792. Elsevier, 1988.
- [187] Scott Eberhardt and Scott Imlay. Diagonal implicit scheme for computing flows with finite rate chemistry. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 6(2):208–216, 1992.

- [188] Yaqing Fan, Louis J Durlofsky, and Hamdi A Tchelepi. A fully-coupled flow-reactive-transport formulation based on element conservation, with application to co 2 storage simulations. *Advances in Water Resources*, 42:47–61, 2012.
- [189] Omar M Knio, Habib N Najm, and Peter S Wyckoff. A semi-implicit numerical scheme for reacting flow: II. stiff, operator-split formulation. *Journal of Computational Physics*, 154(2):428–467, 1999.
- [190] Gregory J McRae, William R Goodin, and John H Seinfeld. Numerical solution of the atmospheric diffusion equation for chemically reacting flows. *Journal of Computational Physics*, 45(1):1–42, 1982.
- [191] Randall J LeVeque. *Numerical methods for conservation laws*. Springer Science & Business Media, 1992.
- [192] Robert I McLachlan and G Reinout W Quispel. Splitting methods. *Acta Numerica*, 11:341–434, 2002.
- [193] Michael Crandall and Andrew Majda. The method of fractional steps for conservation laws. *Numerische Mathematik*, 34(3):285–314, 1980.
- [194] E Haier, SP Norsett, and G Wanner. Solving ordinary differential equations i, nonstiff problems. *Section III*, 8, 1987.
- [195] Gerhard Wanner and Ernst Hairer. Solving ordinary differential equations ii. *Stiff and Differential-Algebraic Problems*, 1991.
- [196] Claes Johnson. 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):908–926, 1988.
- [197] Bin Zhang, Hong Liu, Fang Chen, and Jian Hang Wang. The equilibrium state method for hyperbolic conservation laws with stiff reaction terms. *Journal of Computational Physics*, 263:151–176, 2014.
- [198] Wei Wang, Chi-Wang Shu, HC Yee, and Björn Sjögreen. High order finite difference methods with subcell resolution for advection equations with stiff source terms. *Journal of Computational Physics*, 231(1):190–214, 2012.
- [199] Gao Zhi. Advances in perturbation finite difference (pdf) method [j]. *Advances in Mechanics*, 2:003, 2000.
- [200] Z Gao. Numerical perturbation algorithm and its cfd schemes. *Advances in Mechanics*, 40:607–633, 2010.

- [201] CH Yu, Z Gao, and Tony WH Sheu. Development of a symplectic and phase error reducing perturbation finite-difference advection scheme. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 70(2):136–151, 2016.
- [202] Phillip Colella, Andrew Majda, and Victor Roytburd. Theoretical and numerical structure for reacting shock waves. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 7(4):1059–1080, 1986.
- [203] Weizhu Bao and Shi Jin. The random projection method for hyperbolic conservation laws with stiff reaction terms. *Journal of Computational Physics*, 163(1):216–248, 2000.
- [204] Weizhu Bao and Shi Jin. The random projection method for stiff detonation capturing. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 23(3):1000–1026, 2001.
- [205] Weizhu Bao and Shi Jin. The random projection method for stiff multispecies detonation capturing. *Journal of Computational Physics*, 178(1):37–57, 2002.
- [206] Shih-Hung Chang. *On the application of subcell resolution to conservation laws with stiff source terms*. National Aeronautics and Space Administration, 1989.
- [207] Joseph M Powers and Samuel Paolucci. Accurate spatial resolution estimates for reactive supersonic flow with detailed chemistry. *AIAA journal*, 43(5):1088–1099, 2005.
- [208] Ami Harten. Eno schemes with subcell resolution. *Journal of Computational Physics*, 83(1):148–184, 1989.
- [209] Wei Wang, Chi-Wang Shu, HC Yee, et al. High order finite difference methods with subcell resolution for stiff multispecies discontinuity capturing. *Communications in Computational Physics*, 17(02):317–336, 2015.
- [210] HC Yee, Dmitry V Kotov, Wei Wang, et al. Spurious behavior of shock-capturing methods by the fractional step approach: Problems containing stiff source terms and discontinuities. *Journal of Computational Physics*, 241:266–291, 2013.
- [211] HC Yee and Björn Sjögreen. High order filter methods for wide range of compressible flow speeds. In *Spectral and High Order Methods for Partial Differential Equations*, pages 327–337. Springer, 2011.
- [212] T Poinsot, T Echekki, and MG Mungal. A study of the laminar flame tip and implications for premixed turbulent combustion. *Combustion science and technology*, 81(1-3):45–73, 1992.

- [213] Vincent Moureau, Benoit Fiorina, and Heinz Pitsch. A level set formulation for premixed combustion les considering the turbulent flame structure. *Combustion and Flame*, 156(4):801–812, 2009.
- [214] Duc Nguyen, Frédéric Gibou, and Ronald Fedkiw. A fully conservative ghost fluid method and stiff detonation waves. In *12th Int. Detonation Symposium, San Diego, CA*, 2002.
- [215] A Smolianski, O Shipilova, and H Haario. A fast high-resolution algorithm for linear convection problems: particle transport method. *International journal for numerical methods in engineering*, 70(6):655–684, 2007.
- [216] Louis Moresi, Frédéric Dufour, and H-B Mühlhaus. A lagrangian integration point finite element method for large deformation modeling of viscoelastic geomaterials. *Journal of Computational Physics*, 184(2):476–497, 2003.
- [217] Li Dong and Bin Wang. Trajectory-tracking scheme in lagrangian form for solving linear advection problems: preliminary tests. *Monthly Weather Review*, 140(2):650–663, 2012.
- [218] Lipeng Liu and Marley Becerra. An efficient semi-lagrangian algorithm for simulation of corona discharges: the position-state separation method. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 44(11):2822–2831, 2016.
- [219] O Shipilova, H Haario, and A Smolianski. Particle transport method for convection problems with reaction and diffusion. *International journal for numerical methods in fluids*, 54(10):1215–1238, 2007.
- [220] Hua Ji, Fue-Sang Lien, and Eugene Yee. A new adaptive mesh refinement data structure with an application to detonation. *Journal of Computational Physics*, 229(23):8981–8993, 2010.
- [221] Alan C Calder, LJ Curtis, Bruce C Dursi, 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*, page 56. IEEE Computer Society, 2000.
- [222] Guang-Shan Jiang and Chi-Wang Shu. Efficient implementation of weighted eno schemes. *Journal of computational physics*, 126(1):202–228, 1996.
- [223] Rafael Borges, Monique Carmona, Bruno Costa, and Wai Sun Don. An improved weighted essentially non-oscillatory scheme for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 227(6):3191–3211, 2008.

- [224] Zhi Jian Wang and RF Chen. Optimized weighted essentially nonoscillatory schemes for linear waves with discontinuity. *Journal of Computational Physics*, 174(1):381–404, 2001.
- [225] Chi-Wang Shu and Stanley Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes, ii. *Journal of Computational Physics*, 83(1):32–78, 1989.
- [226] Bernardo Cockburn and Chi-Wang Shu. Nonlinearly stable compact schemes for shock calculations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 31(3):607–627, 1994.
- [227] Yiqing Shen, Guowei Yang, and Zhi Gao. High-resolution finite compact difference schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 216(1):114–137, 2006.
- [228] H.C Yee, N.D Sandham, and M.J Djomehri. Low-dissipative high-order shock-capturing methods using characteristic-based filters. *Journal of Computational Physics*, 150(1):199–238, 1999.
- [229] Yiqing Shen, Gecheng Zha, and Xiangying Chen. High order conservative differencing for viscous terms and the application to vortex-induced vibration flows. *Journal of Computational Physics*, 228(22):8283–8300, 2009.
- [230] Sergio Pirozzoli. Numerical methods for high-speed flows. *Annual review of fluid mechanics*, 43:163–194, 2011.
- [231] Qiang Zhou, Zhaohui Yao, Feng He, et al. A new family of high-order compact upwind difference schemes with good spectral resolution. *Journal of Computational Physics*, 227(2):1306–1339, 2007.
- [232] Gang Li and Jianxian Qiu. Hybrid weighted essentially non-oscillatory schemes with different indicators. *Journal of Computational Physics*, 229(21):8105–8129, 2010.
- [233] Hongqiang Zhu and Jianxian Qiu. Adaptive runge–kutta discontinuous galerkin methods using different indicators: one-dimensional case. *Journal of Computational Physics*, 228(18):6957–6976, 2009.
- [234] Jianxian Qiu and Chi-Wang Shu. A comparison of troubled-cell indicators for runge–kutta discontinuous galerkin methods using weighted essentially nonoscillatory limiters. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 27(3):995–1013, 2005.
- [235] Bernardo Cockburn and Chi-Wang Shu. Tvb runge-kutta local projection discontinuous galerkin finite element method for conservation laws. ii. general framework. *Mathematics of computation*, 52(186):411–435, 1989.

- [236] Zhengfu Xu and Chi-Wang Shu. Anti-diffusive flux corrections for high order finite difference weno schemes. *Journal of Computational Physics*, 205(2):458–485, 2005.
- [237] Rupak Biswas, Karen D Devine, and Joseph E Flaherty. Parallel, adaptive finite element methods for conservation laws. *Applied Numerical Mathematics*, 14(1-3):255–283, 1994.
- [238] Lilia Krivodonova, J Xin, J-F Remacle, Nicolas Chevaugeon, and Joseph E Flaherty. Shock detection and limiting with discontinuous galerkin methods for hyperbolic conservation laws. *Applied Numerical Mathematics*, 48(3-4):323–338, 2004.
- [239] Paul Woodward and Phillip Colella. The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks. *Journal of computational physics*, 54(1):115–173, 1984.
- [240] Moysey Brio and Cheng Chin Wu. An upwind differencing scheme for the equations of ideal magnetohydrodynamics. *Journal of computational physics*, 75(2):400–422, 1988.
- [241] Wenlong Dai and Paul R Woodward. An approximate riemann solver for ideal magnetohydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 111(2):354–372, 1994.
- [242] Pekka Janhunen. A positive conservative method for magnetohydrodynamics based on hll and roe methods. *Journal of Computational Physics*, 160(2):649–661, 2000.
- [243] Katharine F Gurski. An hllc-type approximate riemann solver for ideal magnetohydrodynamics. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 25(6):2165–2187, 2004.
- [244] Ville Honkkila and Pekka Janhunen. Hllc solver for ideal relativistic mhd. *Journal of Computational Physics*, 223(2):643–656, 2007.
- [245] Takahiro Miyoshi and Kanya Kusano. A multi-state hll approximate riemann solver for ideal magnetohydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 208(1):315–344, 2005.
- [246] Robert W MacCormack. Non-equilibrium ionized flow simulations within strong electromagnetic fields. In *48th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition: Aerospace Sciences Meetings*, pages 2010–0225, 2010.
- [247] RW MacCormack. An upwind conservation form method for ideal magnetohydrodynamics equations, aiaa, 1999.
- [248] CK Lombard, J Bardina, E Venkatapathy, et al. Multi-dimensional formulation of cscm—an upwind flux difference eigenvector split method for the compressible navier-stokes equations. In *6th Computational Fluid Dynamics Conference*, pages 649–664, 1983.
- [249] Meng-Sing Liou. Progress towards an improved cfd method: Ausm+. *AIAA paper*, 1701:155, 1995.

- [250] Meng-Sing Liou. *Ten Years in the Making: AUSM-family*. National Aeronautics and Space Administration, Glenn Research Center, 2001.
- [251] D Hänel, R Schwane, and G Seider. On the accuracy of upwind schemes for the solution of the navier-stokes equations. *AIAA paper*, 1105:1987, 1987.
- [252] Jack R Edwards. A low-diffusion flux-splitting scheme for navier-stokes calculations. *Computers & Fluids*, 26(6):635–659, 1997.
- [253] Ge-Cheng Zha. A low diffusion e-cusp upwind scheme for transonic flows. In *34th AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit*, page 2707, 2004.
- [254] GC Zha. Comparative study of upwind scheme performance for entropy condition and discontinuities, aiaa, 1999. Technical report, Paper 99-CP-3348, June 28-July 1.
- [255] Ge-Cheng Zha and Zongjun Hu. Calculation of transonic internal flows using an efficient high-resolution upwind scheme. *AIAA journal*, 42(2):205–214, 2004.
- [256] Ge-Cheng Zha, Yiqing Shen, and Baoyuan Wang. An improved low diffusion e-cusp upwind scheme. *Computers & Fluids*, 48(1):214–220, 2011.
- [257] RK Agarwal, J Augustinus, and DW Halt. 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*, pages 99–3613, 1999.
- [258] Sang-Hoon Han, Jeong-Il Lee, and Kyu Hong Kim. Accurate and robust pressure weight advection upstream splitting method for magnetohydrodynamics equations. *AIAA journal*, 47(4):970, 2009.
- [259] Yiqing Shen, Gecheng Zha, and Manuel A Huerta. E-cusp scheme for the equations of ideal magnetohydrodynamics with high order weno scheme. *Journal of Computational Physics*, 231(19):6233–6247, 2012.
- [260] HC Yee and Björn Sjögreen. Development of low dissipative high order filter schemes for multiscale navier–stokes/mhd systems. *Journal of Computational Physics*, 225(1):910–934, 2007.
- [261] Jorge Balbás, Eitan Tadmor, and Cheng-Chin Wu. Non-oscillatory central schemes for one-and two-dimensional mhd equations: I. *Journal of Computational Physics*, 201(1):261–285, 2004.
- [262] Datta V Gaitonde. Development of a solver for 3-d non-ideal magnetogasdynamics. *AIAA paper*, 99:3610, 1999.

- [263] JS Shang. Recent research in magneto-aerodynamics. *Progress in Aerospace Sciences*, 37(1):1–20, 2001.
- [264] Dinshaw S Balsara and Daniel S Spicer. A staggered mesh algorithm using high order godunov fluxes to ensure solenoidal magnetic fields in magnetohydrodynamic simulations. pages 270–292, 1999.
- [265] Kenneth G Powell, Philip L Roe, Timur J Linde, et al. A solution-adaptive upwind scheme for ideal magnetohydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 154(2):284–309, 1999.
- [266] Jeremiah U Brackbill and Daniel C Barnes. The effect of nonzero  $\nabla \cdot \mathbf{b}$  on the numerical solution of the magnetohydrodynamic equations. *Journal of Computational Physics*, 35(3):426–430, 1980.
- [267] Gábor Tóth. The  $\nabla \cdot \mathbf{b} = 0$  constraint in shock-capturing magnetohydrodynamics codes. *Journal of Computational Physics*, 161(2):605–652, 2000.
- [268] S. A Orszag and C. M Tang. Small-scale structure of two-dimensional magnetohydrodynamic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 90(1):129–143, 1979.
- [269] Guang-Shan Jiang and Cheng-chin Wu. A high-order weno finite difference scheme for the equations of ideal magnetohydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 150(2):561–594, 1999.
- [270] Richard Saurel and Rémi Abgrall. A multiphase godunov method for compressible multifluid and multiphase flows. *Journal of Computational Physics*, 150(2):425–467, 1999.
- [271] Douglas B Kothe and William J Rider. A comparison of interface tracking methods. Technical report, Los Alamos National Lab., NM (United States), 1995.
- [272] Holger Grosshans, R-Z Szász, and Laszlo Fuchs. Development of an efficient statistical volumes of fluid–lagrangian particle tracking coupling method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 74(12):898–918, 2014.
- [273] Junseok Kim and John Lowengrub. Phase field modeling and simulation of three-phase flows. *Interfaces and free boundaries*, 7(4):435–466, 2005.
- [274] Elin Olsson and Gunilla Kreiss. A conservative level set method for two phase flow. *Journal of computational physics*, 210(1):225–246, 2005.
- [275] Eugenio Aulisa, Sandro Manservisi, and Ruben Scardovelli. 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):611–639, 2003.

- [276] Joseph O. Hirschfelder and Charles F. Curtiss. Theory of detonations. i. irreversible unimolecular reaction. *Journal of Chemical Physics*, 28(6):1130–1147, 1958.
- [277] Ernst Hairer and Gerhard Wanner. Stiff differential equations solved by radau methods. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 111(1):93–111, 1999.
- [278] 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.
- [279] 申义庆, 高智, 杨顶辉. 一阶双曲方程的摄动有限差分格式. *计算物理*, 22(6):650–656, 2005.
- [280] 高智, 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):88–92, 2004.
- [281] Lawrence F Shampine. *Numerical solution of ordinary differential equations*, volume 4. CRC Press, 1994.
- [282] Germund G Dahlquist. A special stability problem for linear multistep methods. *BIT Numerical Mathematics*, 3(1):27–43, 1963.
- [283] Ching-Shan Chou and Chi-Wang Shu. 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):992–1020, 2007.
- [284] Matania Ben-Artzi. The generalized riemann problem for reactive flows. *Journal of Computational physics*, 81(1):70–101, 1989.
- [285] Alexandre Joel Chorin. Random choice solution of hyperbolic systems. *Journal of Computational Physics*, 22(4):517–533, 1976.
- [286] Phillip Colella. Glimm’s method for gas dynamics. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 3(1):76–110, 1982.
- [287] Richard Courant and Kurt Otto Friedrichs. *Supersonic flow and shock waves*, volume 21. Springer Science & Business Media, 1999.
- [288] DV Kotov, HC Yee, W Wang, et al. On spurious numerics in solving reactive equations. *Proceedings of the ASTRONUM-2012, The Big Island, Hawaii*, pages 24–28, 2012.
- [289] P Hwang, RP Fedkiw, B Merriman, et al. Numerical resolution of pulsating detonation waves. *DCJ*, 2:1, 2000.
- [290] Christiane Helzel, Randall J Leveque, and Gerald Warnecke. A modified fractional step method for the accurate approximation of detonation waves. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 22(4):1489–1510, 2000.

- [291] Daniel R Stull and Harold Prophet. Janaf thermochemical tables. Technical report, National Standard Reference Data System, 1971.
- [292] E Schultz and J Shepherd. Validation of detailed reaction mechanisms for detonation simulation. 2000.
- [293] G Balakrishnan and FA Williams. Turbulent combustion regimes for hypersonic propulsion employing hydrogen-air diffusion flames. *Journal of Propulsion and Power*, 10(3):434–436, 1994.
- [294] CM Guirao, R Knystautas, and JHS Lee. *A summary of hydrogen-air detonation experiments*. Division of Systems Research, Office of Nuclear Regulatory Research, US Nuclear Regulatory Commission, 1989.
- [295] AV Trotsyuk. Numerical simulation of the structure of two-dimensional gaseous detonation of an h<sub>2</sub>-o<sub>2</sub>-ar mixture. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, 35(5):549–558, 1999.
- [296] Chun Wang, De-liang Zhang, and Zong-lin Jiang. Numerical investigation of detonation sweeping on an interface of inert gas and its decoupling. *Explosion and Shock Waves*, 26(6):556, 2006.
- [297] Loren E Bollinger. Experimental detonation velocities and induction distances in hydrogen-air mixtures. *AIAA Journal*, 2(1):131–133, 1964.
- [298] Raza Akbar. Mach reflection of gaseous detonations. 1997.
- [299] Elaine S Oran, James W Weber, Eliza I Stefaniv, Michel H Lefebvre, and John D Anderson. A numerical study of a two-dimensional h 2-o 2-ar detonation using a detailed chemical reaction model. *Combustion and Flame*, 113(1):147–163, 1998.
- [300] 胡宗民, 牟乾辉, 张德良等. 爆轰波在弯管内传播过程数值分析. *计算物理*, 21(5):408–414, 2004.
- [301] Yu Lv and Matthias Ihme. Development of discontinuous galerkin method for detonation and supersonic combustion. *AIAA Paper*, 688:2013, 2013.
- [302] Ralf Deiterding and Georg Bader. High-resolution simulation of detonations with detailed chemistry. In *Analysis and Numerics for Conservation Laws*, pages 69–91. Springer, 2005.
- [303] Christopher A Eckett. *Numerical and analytical studies of the dynamics of gaseous detonations*. PhD thesis, Citeseer, 2000.
- [304] DH Edwards, JR Walker, and MA Nettleton. On the propagation of detonation waves along wedges. *Archivum Combustionis*, 4:197–209, 1984.

- [305] Changming Guo, Changjian Wang, Shengli Xu, et al. Cellular pattern evolution in gaseous detonation diffraction in a 90-branched channel. *Combustion and flame*, 148(3):89–99, 2007.
- [306] CJ Wang, SL Xu, and CM Guo. Gaseous detonation propagation in a bifurcated tube. *Journal of Fluid Mechanics*, 599:81–110, 2008.
- [307] X-Y Hu, D-L Zhang, and Z-L Jiang. Numerical simulation of gaseous detonation with detailed chemical reaction model. *Acta Aerodynamica Sinica*, 21(1):59–66, 2003.
- [308] GD Roy, SM Frolov, AA Borisov, et al. Pulse detonation propulsion: challenges, current status, and future perspective. *Progress in Energy and Combustion Science*, 30(6):545–672, 2004.
- [309] 张薇, 刘云峰, 姜宗林等. 气相爆轰波胞格尺度与点火延迟时间关系研究. 2014.
- [310] Yunfeng Liu and Zonglin Jiang. Reconsideration on the role of the specific heat ratio in arrhenius law applications. *Acta Mechanica Sinica*, 24(3):261–266, 2008.
- [311] Nasser Ashgriz and JY Poo. Flair: Flux line-segment model for advection and interface reconstruction. *Journal of computational physics*, 93(2):449–468, 1991.
- [312] Mark Sussman. 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):110–136, 2003.
- [313] Mark Sussman and Elbridge Gerry Puckett. A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3d and axisymmetric incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 162(2):301–337, 2000.
- [314] William J Rider and Douglas B Kothe. Reconstructing volume tracking. *Journal of computational physics*, 141(2):112–152, 1998.
- [315] Min Soo Kim and Woo Il Lee. 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):765–790, 2003.
- [316] Min Soo Kim, Jong Sun Park, and Woo Il Lee. 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):791–812, 2003.
- [317] Carlos M Lemos. Higher-order schemes for free surface flows with arbitrary configurations. *International journal for numerical methods in fluids*, 23(6):545–566, 1996.

- [318] José Gomes and Olivier Faugeras. Reconciling distance functions and level sets. In *Biomedical Imaging, 2002. 5th IEEE EMBS International Summer School on*, pages 15–pp. IEEE, 2002.
- [319] CM Lemos. A simple numerical technique for turbulent flows with free surfaces. *International journal for numerical methods in fluids*, 15(2):127–146, 1992.
- [320] BD Nichols and CW Hirt. Improved free surface boundary conditions for numerical incompressible-flow calculations. *Journal of Computational Physics*, 8(3):434–448, 1971.
- [321] Harlow F and Welch JE. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with a free surface. *Phys Fluids*, 8(218):2–9, 1965.
- [322] Anthony A Amsden and Francis Harvey Harlow. The smac method: A numerical technique for calculating incompressible fluid flows. Technical report, Los Alamos Scientific Lab., N. Mex., 1970.
- [323] P.A.M. Dirac. The lorentz transformation and absolute time. *Physica*, 19(1–12):888–896, 1953.
- [324] R.P Feynman and F.L Vernon Jr. The theory of a general quantum system interacting with a linear dissipative system. *Annals of Physics*, 24:118–173, 1963.
- [325] Randall J LeVeque and Helen C Yee. A study of numerical methods for hyperbolic conservation laws with stiff source terms. *Journal of computational physics*, 86(1):187–210, 1990.
- [326] Anne Bourlioux, Andrew J Majda, and Victor Roytburd. Theoretical and numerical structure for unstable one-dimensional detonations. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 51(2):303–343, 1991.
- [327] Rolf Jeltsch and Petra Klingensteiner. 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):231–249, 1999.
- [328] AC Berkenbosch, EF Kaasschieter, and Rupert Klein. Detonation capturing for stiff combustion chemistry. *Combustion Theory and Modelling*, 2(3):313–348, 1998.
- [329] Björn Engquist and Björn Sjögreen. *Robust difference approximations of stiff inviscid detonation waves*. Department of Mathematics, University of California, Los Angeles, 1991.

- [330] Shih-Hung Chang. On the application of eno scheme with subcell resolution to conservation laws with stiff source terms. In *Computational Fluid Dynamics Symposium on Aeropropulsion*, volume 1, pages 215–225, 1991.
- [331] Luca Tosatto and Luigi Vigevano. Numerical solution of under-resolved detonations. *Journal of Computational Physics*, 227(4):2317–2343, 2008.
- [332] Martha W Evans, Francis H Harlow, and Eleazer Bromberg. The particle-in-cell method for hydrodynamic calculations. Technical report, DTIC Document, 1957.
- [333] Francis H Harlow. Hydrodynamic problems involving large fluid distortions. *Journal of the ACM (JACM)*, 4(2):137–142, 1957.
- [334] J Eddie Welch, Francis Harvey Harlow, John P Shannon, et al. The mac method-a computing technique for solving viscous, incompressible, transient fluid-flow problems involving free surfaces. Technical report, Los Alamos Scientific Lab., Univ. of California, N. Mex., 1965.
- [335] Matania Ben-Artzi. The generalized riemann problem for reactive flows. *Journal of Computational physics*, 81(1):70–101, 1989.
- [336] FH Chipman. A-stable runge-kutta processes. *BIT Numerical Mathematics*, 11(4):384–388, 1971.
- [337] Tariq D Aslam. A level-set algorithm for tracking discontinuities in hyperbolic conservation laws: I. scalar equations. *Journal of Computational Physics*, 167(2):413–438, 2001.
- [338] Tariq D Aslam. A level set algorithm for tracking discontinuities in hyperbolic conservation laws ii: systems of equations. *Journal of Scientific computing*, 19(1-3):37–62, 2003.
- [339] Stanley Osher and Ronald Fedkiw. *Level set methods and dynamic implicit surfaces*, volume 153. Springer Science & Business Media, 2006.
- [340] Ronald P Fedkiw, Tariq Aslam, Barry Merriman, et al. A non-oscillatory eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the ghost fluid method). *Journal of computational physics*, 152(2):457–492, 1999.
- [341] CW Wang, TG Liu, and BC Khoo. A real ghost fluid method for the simulation of multi-medium compressible flow. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 28(1):278–302, 2006.
- [342] Paul Batten, Nicholas Clarke, Claire Lambert, et al. On the choice of wavespeeds for the hllc riemann solver. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 18(6):1553–1570, 1997.

- [343] XY Hu, NA Adams, and Gianluca Iaccarino. On the hllc riemann solver for interface interaction in compressible multi-fluid flow. *Journal of Computational Physics*, 228(17):6572–6589, 2009.
- [344] Paul Glaister. An approximate linearised riemann solver for the euler equations for real gases. *Journal of Computational Physics*, 74(2):382–408, 1988.
- [345] Xiang Yu Hu and Boo Cheong Khoo. An interface interaction method for compressible multifluids. *Journal of Computational Physics*, 198(1):35–64, 2004.
- [346] XY Hu, BC Khoo, Nikolaus A Adams, et al. A conservative interface method for compressible flows. *Journal of Computational Physics*, 219(2):553–578, 2006.
- [347] James Edward Pilliod and Elbridge Gerry Puckett. Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces. *Journal of Computational Physics*, 199(2):465–502, 2004.
- [348] 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.
- [349] James Glimm, John W Grove, XL Li, et al. Simple front tracking. *Contemporary Mathematics*, 238(2):133–149, 1999.
- [350] 赵宁, 余彦, 唐维军. Rm 不稳定性数值模拟方法. 计算数学, 2001.
- [351] Stephen F Davis. An interface tracking method for hyperbolic systems of conservation laws. *Applied Numerical Mathematics*, 10(6):447–472, 1992.
- [352] 张德良. 计算流体力学教程. 高等教育出版社, 2010.
- [353] Michael G Crandall. The semigroup approach to first order quasilinear equations in several space variables. *Israel Journal of Mathematics*, 12(2):108–132, 1972.
- [354] Jonathan Goodman and Zhouping Xin. Viscous limits for piecewise smooth solutions to systems of conservation laws. *Archive for rational mechanics and analysis*, 121(3):235–265, 1992.
- [355] Shih-Hsien Yu. Zero-dissipation limit of solutions with shocks for systems of hyperbolic conservation laws. *Archive for rational mechanics and analysis*, 146(4):275–370, 1999.
- [356] Feimin Huang and Zhen Wang. Convergence of viscosity solutions for isothermal gas dynamics. *SIAM journal on mathematical analysis*, 34(3):595–610, 2002.
- [357] Shuxing Chen. Stability of a mach configuration. *Communications on pure and applied mathematics*, 59(1):1–35, 2006.

- [358] Volker Elling and Tai-Ping Liu. Supersonic flow onto a solid wedge. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 61(10):1347–1448, 2008.
- [359] Grégoire Allaire, Sébastien Clerc, and Samuel Kokh. A five-equation model for the simulation of interfaces between compressible fluids. *Journal of Computational Physics*, 181(2):577–616, 2002.
- [360] Keh-Ming Shyue. An efficient shock-capturing algorithm for compressible multicomponent problems. *Journal of Computational Physics*, 142(1):208–242, 1998.
- [361] Robert R Nourgaliev, Truc-Nam Dinh, and Theo G Theofanous. Adaptive characteristics-based matching for compressible multifluid dynamics. *Journal of Computational Physics*, 213(2):500–529, 2006.
- [362] Bram Van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme iii. upstream-centered finite-difference schemes for ideal compressible flow. *Journal of Computational Physics*, 23(3):263–275, 1977.
- [363] Yiqing Shen and Gecheng Zha. Application of low diffusion e-cusp scheme with high order weno scheme for chemical reacting flows. In *40th Fluid Dynamics Conference and Exhibit*, page 4995, 2010.
- [364] RI Soloukhin. Multiheaded structure of gaseous detonation. *Combustion and Flame*, 10(1):51–58, 1966.
- [365] G.Strang. *Linear Algebra and its Applications*, 3rd ed. Fort Worth, TX: Harcourt Brace Jovanovich, 1988.
- [366] Gilbert Strang. On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 5(3):506–517, 1968.
- [367] Gabriel D Roy, Sergei M Frolov, Kazhikathra Kailasanath, et al. Gaseous and heterogeneous detonations: science to applications. Technical report, DTIC Document, 1999.

## 发表文章目录

- [1] Liu, L., Shen, Y., Liu, S. and Yu, M., The dual information preserving method for stiff reacting flows. Computers and Fluids. Vol.157,(2017.9.3) pp 254-275
- [2] Yiqing Shen , Li Liu , Yan Yang, Multi-step Weighted Essentially Non- oscillatory Scheme, International Journal for Numerical Methods in Fluids Vol.75,(2014.6.10) pp 231-249
- [3] Li Liu, Yiqing Shen, Non-oscillatory Finite Compact Scheme for the Equations of Ideal Magnetohydrodynamics, Applied Mechanics and Materials Vol. 432 (2013) pp 157-162
- [4] Yiqing Shen, Li Liu, Yan Yang, Kai Cui, High Efficiency Finite Compact Scheme for Shock/Complex Flowfield Interaction, 1st International Conference on High Temperature Gas Dynamics, HTGD2012,October, 15-17
- [5] Yiqing shen, Li Liu, Zhi Gao, New constructing method for WENO schemes, Proceedings of 2013Asian-Pacific Conference on Aerospace Technology and Science, May23-26, 2013, Taiwan
- [6] Li Liu, Yiqing Shen, New numerical method for stiff reaction flows, The 12th World Congress on Computational Mechanics, 24-29 July 2016, Seoul, Korea
- [7] 刘利, 申义庆, 化学反应流动方程的时间摄动高精度方法, 第八届全国流体力学学术会议, 2014 年 9 月 18-21, 兰州
- [8] 刘利, 申义庆, 化学反应流动方程刚性问题的算法研究, 2015 年中国力学大会, 2015 年 8 月 15-18, 上海
- [9] 刘利, 申义庆, 可压缩多相流中的新型虚拟流体方法, 第十七届全国计算流体力学会议, 2017 年 7 月, 杭州
- [10] 刘利, 申义庆, 无振荡有限紧致格式在理想磁流体方程求解中的应用, 2012 年高温气体动力学国家重点实验室夏季学术研讨会, 2012 年八月, 吉林延吉
- [11] 刘利, 申义庆, 有限紧致格式中不同激波识别方法比较研究, 2013 年高温气体动力学国家重点实验室夏季学术研讨会, 2013 年八月, 河北
- [12] 刘利, 申义庆, 刚性化学反应流动方程的数值摄动方法, 2014 年高温气体动力学国家重点实验室夏季学术研讨会, 2014 年八月, 北京怀柔
- [13] 刘利, 申义庆, 化学反应方程刚性问题的单元信息点方法, 2015 年高温气体动力学国家重点实验室夏季学术研讨会, 2015 年八月, 北京怀柔

- [14] 刘利, 申义庆, 双信息点保存界面追踪方法, 2016 年高温气体动力学国家重点实验室夏季学术研讨会, 2016 年八月, 北京怀柔
- [15] 刘利, 申义庆, 数值模拟基元反应模型化学反应流动的新方法, 2017 年高温气体动力学国家重点实验室夏季学术研讨会, 2017 年八月, 北京怀柔

## **简历**

### **基本情况**

刘利，男，河北省丰宁县人，1988年10月出生，未婚，中国科学院力学研究所在读博士研究生。

### **教育状况**

2007年9月至2011年7月，哈尔滨工业大学，本科，专业：理论与应用力学

2011年9月至今，中国科学院力学研究所，博士研究生，专业：计算流体力学

### **工作经历**

无。

### **研究兴趣**

计算流体力学，可压缩流动，界面方法

### **联系方式**

通讯地址：北京市海淀区北四环西路15号中科院力学所

邮编：100190

E-mail: bfly123@126.com



## 致谢

诗有云“岁云秋已，日月其除”，恰巧论文完稿时正是北国九月底的初秋，从 2011 年的九月，来到力学所读书已经正好六个春秋。诗又云“岁云秋已，我落其实”，这六年收获良多，其中很多所得都会伴我一生。在这里接触科研、爱上科研，在这里找到了适合我的生活、思考和工作方式。而所有这一切，都离不开家人、老师、同学和师兄弟们的鼓励、陪伴、指导和帮助。

首先要感谢的是我的导师申义庆研究员。在来到力学所之前，我从未接触过科研，也从未接触过流体力学，到力学所后，申老师给予了我极为优越和自由的科研环境，让我慢慢的喜欢上流体力学研究和探索的过程。在科研上，申老师治学严谨，无论论文、报告甚至是个人简介，事无巨细，申老师都会认真帮助修改，为了让我成长，费了很多的心血。在生活中，申老师为人随和，亦师亦友，经常邀请我们吃饭、娱乐，调节假日生活。在这六年里，申老师给了我最多的帮助。

其次，还要感谢课题组其他老师：崔凯老师、郑洪伟老师、杨焱老师，于欣老师，还有故去的高智研究员，他们都在科研和生活上给过我很多宝贵的建议和指导。尤其是高智老师，在我刚来力学所之初，曾给予我特别多的关照，科研上很多想法都给了我启迪，科研一生的态度更值得我学习。

感谢我的同学们、师兄弟们以及所有曾帮助过我的亲戚朋友，他们是：高太元师兄、胡守超师兄、张明锋师兄、李广利、赵文赓、彭峻、刘升平、陈鑑、曾方军、李理、肖尧、徐应洲等等。

最后，感谢我的父亲刘家新和母亲杨丽茹。从不足三十户的小山沟，父母一路支持我四处读书求学，几乎倾其所有给予我最大的支持。小学时早上需要去四公里外村里上学，每天早上母亲五点多就起来给我做饭，未尝少过一次，中午为了让我能睡半小时午觉，来回骑自行车接送我。初中时，父母为了我能接受更正规的教育，举家搬到城里。从小体弱多病，父母给予我无微不至的照顾，费心极多，此间种种一言难尽。

从 2007 年上大学至今正好十年，学生时代就这样接近尾声，有太多的愿望和想法尚未未来的及实现，此论文献给我的学生时代，也以此开始下一段科研和生活之路，只有变得更好才能回报所有为我付出的人，“靡不有初，鲜克有终”，以此自勉。