

密级 _____



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

博士学位论文

可压缩流动中间断问题的高分辨率数值求解方法及应用

作者姓名 _____ 刘利 _____

指导教师 _____ 申义庆 研究员 _____

中国科学院力学研究所

学位类别 _____ 理学博士 _____

学科专业 _____ 流体力学 _____

培养单位 _____ 中国科学院力学研究所 _____

2017 年 4 月

Typeset by L^AT_EX 2_• at September 11, 2017
With package **CASthesis** v0.2 of CT_EX.ORG

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

By
Li Liu

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

Institute of Mechanics
University of Chinese Academy of Sciences

April, 2017

摘要

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

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

是结合了激波和界面两类间断类型的间断问题。由于化学反应（如爆轰波）和流动的尺度差距，在采用了简单的化学反应模型的计算中，经常会存在空间刚性问题，不采用界面模型的传统求解方法难以准确计算爆轰波波速甚至可能产生非物理的结构。我们将双信息保存方法应用在组分对流方程求解中，能有效避免由于数值耗散而导致的错误的化学反应激发，因而能够克服化学反应刚性问题。在采用基元反应模型的更精细的爆轰反应求解中，采用了双信息保存方法的新的求解方法可以有效保持总组分的守恒性，在总的精度方面相比于传统的求解方法同样有所很大的提高，数值结果表明所发展方法的有效性。

- (4) 本文还针对高速化学反应流动的时间刚性问题，发展了常微分方程（ODE）求解的数值摄动格式，提高了计算的稳定性和计算效率。

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

Abstract

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

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

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

to solve the interface with more than three phases or with the diffusive interface model. The diffusive interface is used when the thickness of the interface region can not be ignored such as in the cases with diffusion, phase changing or chemical reaction. Considering that, the existed interface methods such as Level-set method and VOF method are all have problems when used in the diffusive interface, in this paper, a new Euler-Lagrange method — dual information preserving (DIP) method is constructed, In the DIP method, two kinds of Lagrangian points are introduced into the Eulerian mesh, one kind of points is limited in every cell called cell-point to transmit the information between the Eulerian cells and the Lagrangian points. Another kind of point named as particle-point is traced in the whole computation to keep the accuracy and sharp ouline 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 treat as a diffusive interface. With a simple reaction model, the difference in the scales between the reaction and convection may cause huge spatial stiff problems. Without a suitable method, a wrong detonation speed or unphysical wave structure may appear in the result. As the DIP method can compute the diffusive interface, in this paper, DIP method is used to restrict the incorrect reaction activation caused by the numerical dissipation. In the reacting flows with elementary reaction model, with the new method, the results also show significantly improvmment in the conservation and accuracy.

In this paper, we also construct a numerical perturbation method for the ordinary difference equation(ODE) to solve the reaction flows which may has temporal stiff problem.

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

目录

| | |
|---------------------------------------|-----|
| 摘要 | i |
| Abstract | iii |
| 目录 | v |
| 第一章 引言 | 1 |
| 1.1 本文研究的范围及其方程系统 | 2 |
| 1.1.1 单介质 Euler 方程 | 2 |
| 1.1.2 理想磁流体方程 | 3 |
| 1.1.3 多介质 Euler 方程 | 5 |
| 1.1.4 高速化学反应 Euler 方程 | 6 |
| 1.2 可压缩流中间断问题的理论研究简介 | 10 |
| 1.2.1 Euler 方程弱解及解存在性的研究 | 10 |
| 1.2.2 黎曼问题和 Euler 方程近似解 | 12 |
| 1.3 计算流体力学和数值方法发展 | 13 |
| 1.3.1 计算流体力学简介 | 13 |
| 1.3.2 数值方法的发展 | 14 |
| 1.4 间断问题数值研究现状和不足 | 19 |
| 1.4.1 激波捕捉格式和激波分辨率 | 19 |
| 1.4.2 物质界面和界面追踪方法 | 20 |
| 1.4.3 气相爆轰波 | 22 |
| 1.5 本文所开展研究内容 | 31 |
| 第二章 双信息保存方法在基元反应模型爆轰中的应用 | 33 |
| 2.1 基元反应模型中的热力学参数 | 33 |

| | |
|---|-----------|
| 2.2 温度求解方法 | 34 |
| 2.3 数值算例 | 36 |
| 2.3.1 新方法有效性的验证 | 36 |
| 2.3.2 新方法和传统方法在组分守恒性方面的比较 | 42 |
| 2.3.3 新方法和传统方法在计算精度方面的比较 | 42 |
| 2.3.4 新方法和传统方法在计算效率方面的比较 | 42 |
| 2.3.5 二维爆轰 | 45 |
| 2.4 小结 | 45 |
| Appendix A 化学反应中相关尺度的探讨 | 53 |
| A.1 化学反应时间尺度分析方程和空间尺度分析方程 | 53 |
| A.2 尺度分析 [232] | 55 |
| Appendix B 二维 DIP 方法伪代码 | 57 |
| Appendix C 化学反应不同组分热力学拟合参数 | 61 |
| 参考文献 | 63 |

表格

| | |
|------------------------------|----|
| 2.1 不同 ODE 格式精度分析..... | 36 |
| 2.3 不同条件下理论值、计算值和实验值对比..... | 41 |
| 2.4 对流不通过程所需时间 (20 次循环)..... | 44 |
| 2.5 各种简化过程带来的时间节省 | 44 |
| C.1 不同 ODE 格式精度分析..... | 62 |

插图

| | | |
|------|--|----|
| 1.1 | 过渡点示意图 [255]。 | 20 |
| 1.2 | 典型爆轰波压力曲线 [259] | 23 |
| 1.3 | 二维胞格结构示意图 [259]。 | 24 |
| 1.4 | 一个典型的爆轰波虚假传播计算结果 [302] | 27 |
| 1.5 | $2H_2 + O_2 + 7Ar$ 反应组分摩尔比变化和激波前沿距离间关系 [232] | 29 |
| 1.6 | $2H_2 + O_2 + 7Ar$ 反应不同特征值空间尺度和激波前沿距离间关系 [232] | 30 |
| 2.1 | $2H_2+O_2$ 算例计算结果 | 38 |
| 2.2 | $2H_2 + O_2 + Ar$ 算例计算结果 | 39 |
| 2.3 | $2H_2+O_2+7Ar$ 算例计算结果 | 40 |
| 2.4 | $2H_2+O_2+10.33Ar$ 算例计算结果 | 41 |
| 2.5 | $2H_2+O_2+10.33Ar$ 算例对比结果 | 47 |
| 2.6 | $2H_2+O_2+10.33Ar$ 算例对比结果 2 | 48 |
| 2.7 | $2H_2+O_2+10.33Ar$ 算例对比结果 3 | 49 |
| 2.8 | 不同网格下计算结果对比 | 50 |
| 2.9 | 稀疏网格下不同方法计算结果对比 1, $N = 600$ | 51 |
| 2.10 | 稀疏网格下不同方法计算结果对比 2, $N = 600$ | 52 |
| 2.11 | $2H_2+O_2+Ar$ 爆轰实验结果和数值结果 [348] | 52 |
| 2.12 | $2H_2+O_2+Ar$ 爆轰数值结果 | 52 |

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更广义的不连续函数空间寻求弱解。弱解是普遍存在的，实际上，对于几乎所有连续力学模型都遵循的非线性双曲守恒方程的初值问题 (Cauchy 问题) 来说，即使初始值是光滑的，解在有限时间内也会发展出奇异性 [237, 267, 340]。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，间断主要体现为激波、接触间断、物质界面、爆轰（燃）波等。

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，激波成因已经得到极为充分的研究 [207, 218]，然而更复杂的激波间或是激波与其他结构如激波/边界层、激波/界面间的相互作用等仍是当今理论研究 [15, 133, 212, 333]、实验研究 [6, 202, 288] 和数值模拟 [115, 308, 310] 的热点，有很强的工程背景。除此之外，在化学反应流中，激波和化学反应相互作用还能形成如爆燃波、爆轰波等衍生的间断类型，其中爆轰波 [95, 103, 171] 的研究在诸如发动机 [40, 41]、高能炸药爆炸 [51, 79, 171] 等诸多领域均有重要应用。

当流体中存在压强无法匹配时，根据特征线是汇聚或是发散的，会形成激波或稀疏波，当压力可以匹配而密度无法匹配时或存在不同状态的物质时，就会出现接触间断或界面 [337]，事实上界面是不同状态的物质间存在的一种特殊的接触间断类型 [55]，因此有些学者也把接触间断称为接触界面 [8, 282]。通过接触间断，压力和法向速度连续而密度、切向速度以及物质状态可能存在间断。界面问题集中体现在各种多相流研究中，是其中最为关键问题，也是难点所在。多相流在高速可压缩流动中同样有广泛应用 [37]，如空化 [24, 119, 315]、燃烧室混合 [170]、反应堆蒸汽发生器 [161] 和发电厂锅炉等方面。

激波和接触间断是孤立存在的吗？恰恰相反，可压缩多相流中广泛存在激波，而激波/界面相互作用极大增加了界面问题研究的难度 [189, 203, 242]。

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、界面追踪方法和刚性化学反应流及爆轰波相关研究等。

本文研究涉及四种方程系统，包括可压缩单介质理想气体、理想磁流体、存在界面的多介质流体以及存在化学反应的可压缩多组分气体混合物。下面分别给出具体的方程系统。

1.1.1 单介质 Euler 方程

研究各种常见单介质可压缩流动问题时，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、多相流及化学反应流等复杂方程系统研究的基础。下面给出二维守恒型 Euler 方程：

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

其中

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

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

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

其中 γ 为比热比。

虽然 Euler 方程形式较 NS 方程大大简化，但是采用 Euler 方程至少有四

点实际意义：

1. 可以认为 Euler 方程是 NS 方程在大雷诺数下的一种特例情况 [350]。
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，比如激波结构，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，本文主要采用无黏 Euler 方程系统。

1.1.2 理想磁流体方程

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

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

其中

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

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

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

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

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, 该方程有重要作用 [96]。

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

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

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

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

快波和慢波为

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

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

对于一维方程系统来说，如果任意 u 的特征根都不相同，则认为该双曲系统为严格的双曲系统 [245]，而方程 (1.3) 中，三个波速在特殊情况下可能等值，因此该系统为非严格双曲 (non-strictly hyperbolic) 系统 [69, 239, 245]。

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工作。

1.1.3 多介质 Euler 方程

界面问题是多介质、多相流中最基本问题，在多介质可压缩流中同样具有重要地位，界面出现在存在明确分界面的流体中，本文采用无相变、无扩散的多介质 Euler 方程描述这一问题，该方程系统也是描述界面问题的最简单系统。多介质 Euler 方程和单介质方程 (1.1) 相似，只是增加一个标记不同介质的方程，和界面相关的方程多采用非守恒形式，

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} = 0 \\ \frac{\partial z}{\partial t} + u \frac{\partial z}{\partial x} + v \frac{\partial z}{\partial y} = 0 \end{cases} \quad (1.5)$$

其中

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

不同介质具有不相同的状态方程形式和参数，以两介质问题为例，

$$\begin{cases} \text{状态 1} & \text{当 } z = z_1, \\ \text{状态 2} & \text{当 } z = z_2. \end{cases} \quad (1.6)$$

本文主要研究理想气体和水，理想气体状态方程在公式 (1.2) 中已经给出去，水的状态方程为

$$p = (\gamma - 1)\rho e - \gamma B, \quad (1.7)$$

其中 $\gamma = 7.15$, $B = 3309$ 。

该方程系统忽略了粘性、热传导以及表面张力效应，是研究界面问题的极为简化的模型方程，可能只在高速问题中才有定量的研究的意义，如激波/气泡相互作用 [3, 265]、水下爆炸 [213] 等方面。但是该方程系统仍然在界面问题的数值方法研究以及定性分析等方面有广泛应用。

1.1.4 高速化学反应 Euler 方程

在化学反应流动中，激波会带来新的物理问题，如爆燃和爆轰。爆燃波和爆轰波是化学反应流中具有代表性的间断结构，它们的相关理论、实验以及数值研究在如炸药、发动机等极多高温、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

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} = \mathbf{S} \quad (1.8)$$

其中

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

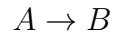
其中 ns 为多组分流体中的组分数， z_i 和 ω_i 分别为 i 组分质量分数和生成率。由于总的质量分数为 1，则第 ns 组分为

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

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

固定比热比单步总包反应模型

对于固定比热比的单步总包反应模型



其中 A 代表反应物，B 代表生成物，反应源项为

$$\omega_1 = -K(T)\rho z, \quad (1.9)$$

其中 K 为反应率可以通过 Arrhenius 率

$$K(T) = K_0 e^{-T_{ign}/T} \quad (1.10)$$

或者如下 Heaviside 率求得

$$K(T) = \begin{cases} 1/\epsilon, & T \geq T_{ign}, \\ 0, & T < T_{ign}, \end{cases} \quad (1.11)$$

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

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

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

$$\sum_{i=1}^{ns} \mu'_{i,j} \chi_i \leftrightarrow \sum_{i=1}^{ns} \mu''_{i,j} \chi_i \quad (j = 1, \dots, nr) \quad (1.12)$$

其中 nr 为反应方程数，化学计量数 μ 为整数， χ_i 代表第 i 组分，上标 ' 正方

向反应化学计量数，“”代表反方向反应化学计量数。 i 组分反应率可以写成

$$\omega_i = W_i \sum_{k=1}^{nr} (\mu''_{i,k} - \mu'_{i,k}) K_k \prod_j^{\text{ns}} \left(\frac{\rho z_j}{W_j} \right)^{\mu'_{j,k}}, \quad (1.13)$$

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

$$p = (\gamma - 1) \left(E - \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2) - \frac{1}{2} \rho u^2 - q_1 \rho z_1 - q_2 \rho z_2 - \dots - q_{ns} \rho z_{ns} \right). \quad (1.14)$$

其中 q_i 为 i 组分反应热。

多步基元反应模型

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

我们同样可以采用公式 (1.12) 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

$$\omega_i = W_i \sum_{k=1}^{nr} (\nu''_{k,i} - \nu'_{k,i}) \left\{ K_{f,k}(T) \prod_{j=1}^{\text{ns}} \gamma_j^{\nu'_{j,k}} - K_{b,k}(T) \prod_{j=1}^{\text{ns}} \gamma_j^{\nu''_{j,k}} \right\} \quad (1.15)$$

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

$$K_{f,k} = A_k T^{b_k} \exp \left(-\frac{E_{a,k}}{R_u T} \right) \quad (1.16)$$

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

$$K_{b,k} = \frac{K_{f,k}}{K_{c,k}}, K_{c,k} = K_{p,k} \left(\frac{p_{atm}}{R_u T} \right)^{\sum_{i=1}^{ns} (\nu''_{i,k} - \nu'_{i,k})} \quad (1.17)$$

其中, p_{atm} 为标准大气压, $K_{p,k}$ 为压力平衡常数

$$K_{p,k} = \exp \left(\sum_{i=1}^{ns} (\nu''_{i,k} - \nu'_{i,k}) \left(\frac{S_i}{R_u} - \frac{H_i}{R_u T} \right) \right) \quad (1.18)$$

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。混合气体的理想气体方程为

$$p = \rho R T = \sum_{i=1}^{ns} \rho_i R_i T = \sum_{i=1}^{ns} z_i \rho_i T = \rho \frac{R_u}{\bar{W}} T \quad (1.19)$$

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 (1.19) 中的 R 为混合气体的特定气体常数 (Special gas constant)

$$R = \sum_{i=1}^{ns} z_i R_i \quad (1.20)$$

R_i 为第 i 个组分的气体常数

$$R_i = \frac{R_u}{W_i} \quad (1.21)$$

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

1.2 可压缩流中间断问题的理论研究简介

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

1.2.1 Euler 方程弱解及解存在性的研究

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

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

$$u_t + \nabla_x f(u) = 0, \quad (1.22)$$

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

弱解定义 [353]: 如果可测向量函数 $u = (u^1, \dots, u^n) : \Omega \subset R_+ \times R_x^d \rightarrow R^n$ 满足

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

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

则称 u 在分布的意义下满足双曲守恒率方程 (1.22)，或称 u 为方程 (1.22) 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 [347]， C 为复数空间。

然而，由于缺乏针对于弱解有效的数学工具，如泛函分析等常用的标准微分工具都不再奏效，当前仅对单守恒率方程有完善的理论研究 [66, 166, 216]，而对于方程组理论的研究，目前主要停留在一维问题，及两方程的二维问题。研究内容也从奢求理论解转移到证明方程解的存在性及数值解的收敛性上来。目前理论研究方法主要包括 Glimm 格式 [104] 和补偿列紧理论 [338, 344]。Glimm 格式曾经是研究方程组解存在性定理的唯一方法，1965 年 Glimm 采用该方法证明了一维单方程的一般形式下“小初值”和特殊形式下“大初值”解得存在性，其中“小初值”指的是初始值总变差 $TV(u_0)$ 充分小，并和 Lax [106] 证明了 2×2 方程组在严格双曲，非线性情况下，初始扰动充分小假设下弱解的存在性。然而该方法依然存在有很多局限性 [190]。补偿列理论在 80 年代由 Tartar 提出 [278, 279]，之后得到广泛研究和应用，尤其在气体动力学方程中，如 1983 年 DiPerna 等 [75]，1985 年 Ding 等人 [49, 74]，1994 年和 1996 年 Lions 等 [180, 181] 的一系列工作解决了气体动力学方程组在不同比热比 γ 下如下形式的等熵流动方程的解存在性问题。

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

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

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

该方法也尚不能给出 Euler 方程解存在性证明。对于高维问题，目前是数学上的一个热点问题，当然也是难点，尚缺乏充分的理论结果 [222, 258, 277]。不过我们都坚信，欧拉方程乃至 NS 方程解的存在性和唯一性终有一天都会得到完善的数学证明。

1.2.2 黎曼问题和 Euler 方程近似解

尽管欧拉方程的解在数学上缺乏足够的存在性证明，但是我们仍然需要通过一定方式求得它的近似解，甚至近似解本身要比解的存在性研究更为久远。我们可以一直追溯到伟大的数学家、物理学家伯恩哈德·黎曼。1858 年，黎曼 [237] 在研究激波管问题时，巧妙的构造了 Euler 方程在一组特殊初值条件下的理论解，这组初值设定为任意间断值的阶跃函数，即

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

根据间断不同，黎曼构造出了四类解，分别由向前、向后稀疏波和向前、向后激波组成，并利用相平面分析方法给出了判别条件。该类 Cauchy 问题被称为黎曼问题。尽管黎曼问题在黎曼所有伟大工作中并不是那么显眼，但是该问题在求解拟线性双曲方程尤其在求解空气动力学方程中起到了第一块基石的作用 [99]，并且开创了“微分方程广义解”概念及“相平面分析”方法之先河，具有的超前性。1957 年 Lax [167, 223, 224] 对一维黎曼解存在性和唯一性给出了证明。至此，一维黎曼问题得到彻底解决，它的理论解由冲击波，中心稀疏波和接触间断三类基本波构成。

二维黎曼问题由于复杂性，到了 80 年代，甚至它问题的提法都尚未澄清。85 年，张同和郑玉玺分析最简二维模型黎曼问题，成为二维问题的一个实质性突破。1990 年他们在文献 [332] 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 [247]，Chang [46, 47] 等，Lax 和 Liu [169] 对这一猜想进行了数值模拟，并最终将二维黎曼问题完善为 19 类。目前为止，尚没有一类情况被完善证明 [351]。

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

1.3 计算流体力学和数值方法发展

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

1.3.1 计算流体力学简介

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

学者们普遍将 1922 年 Lewis Fry Richardson 采用数值方法预测天气的工作 [235] 作为 CFD 开始的标志，在同时期，美国学者也曾采用世界上第一台通用计算机 ENIAC 进行了类似的 CFD 计算。实际上 CFD 尚未真正出现前，相关理论工作早已开始，我们上节已经讲述了大量此类工作，包括 CFD 出现后的大量工作，都可以被划归在数学范围内，我们当然也可以称它们为 CFD 的早期理论研究。如 1928 年，Courant、Friedrichs 和 Lewy [62] 提出有限差分方法求解偏微分方程时收敛的 Courant-Friedrichs-Lowy(CFL) 条件，值得注意的是 CFL 条件只是数值解收敛的一个必要条件，并非充分条件，很多论文甚至书籍提到这项工作时曾出现错误。

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

1.3.2 数值方法的发展

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

有限差分方法使用有限个网格节点代替连续的计算域，以泰勒级数展开等方法，将控制方程中的导数用节点函数值的差商代替进行离散。有限差分方法是一种直接将微分方程变为代数问题的数值方法，直观且简单，发展较为成熟。下面简单的回顾数值方法的发展和现状。

1959 年，Godunov [107] 首先采用数值方法求解非线性偏微分方程，文中他证明，想要保持方程的解是单调的，那么线性对流格式最多只有一阶精度，同时他认为一阶迎风格式在某种意义上是最好的，并且给出了如何将迎风格式应用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，通过在单元交界面求解黎曼问题

$$U_0(x) = \begin{cases} U_L = U_i & x < x_{i+\frac{1}{2}} \\ U_R = U_{i+1} & x > x_{i+\frac{1}{2}} \end{cases} \quad (1.23)$$

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

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

1.3.2.1 空间离散方法

尽管 Godunov 定理将线性方法的稳定性和一阶格式紧紧的绑定，但是在西方学术圈，该研究并没有得到足够的重视，60 和 70 年代，学者们仍然试图构造了一系列更高阶的格式。P.D.Lax 和 B.Wendroff [165] 在 1960 年合作构造了二阶差分格式— Lax-Wendroff 格式，尽管该格式由于耗散不足会导致计算激波时出现严重的振荡，但是仍然具有深远影响。Lax-Wendroff 格式和它的一系列二阶、三阶改进格式 [39, 196, 241, 243] 主导了对流方程研究领域超过了 10 年之久。

直到 70 年代，才有人开始意识到 Godunov 定理的重要性并试图将其避开，这之后不到一年时间，就出现了两种无振荡的高精度对流格式，分别是 Boris 和 Book 提出的通量修正输运方法 (Flux-Corrected Transport/FCT) 方法和接下来 Van Leer 提出的 MUSCL (Monotone Upstream Scheme for Conservation Laws) 格式。FCT 方法依然采用 Lax-Wendroff 方法类似的预估-校正结构，第一步采用一阶格式预估时间发展后的解，然后在校正步通过反扩散的方式移除大量的耗散误差，达到二阶或三阶精度。在第二步，修正的通量会和临时解进行比较，并且在需要的地方进行限制，保证没有新的极值点出现也没有极值增加。其中的对比过程让该方法成为非线性方法。经过 1973 年到 1979 年的发展 [29, 31, 32, 320]，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 [?, 290, 291, 293, 293, 294]。MUSCL 类格式在 80 年代继续发展并成为当时最为流行的格式。FCT 方法和 MUSCL 格式虽然相去甚远，但是它们都是通过方法中的非线性性质来防止计算中大梯度带来的数值振荡，在对流方法接下来的发展中这一特点一直得到了保存。

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

随着算法研究的发展，TVD 类格式暴露出了它们固有的不足，如无法区分激波和光滑的极值点，导致光滑区域精度过低。在不久之后，Goodman 和 LeVeque [110] 认为 TVD 在高维离散中过于呆板，导致高维 TVD 对流格式精度不会高于一阶。Harten 因此重新审视了曾被他忽视的无振荡插值方面的工作，并和 Osher 合作提出了基本无振荡 (Essentially Non-Oscillatory/ENO) 格式 [127, 130]。ENO 格式的基本思想是在构造插值多项式时采用自适应选取最光

滑插值模板的方式来避免引入数值振荡。ENO 格式不再满足 TVD 性质，允许总变差有微小的增加，但是仍需满足总变差有界 (Total-Variation-Bounded/TVB)。

ENO 格式单一选取模板的策略虽然能够达到无振荡的目的，然后由于光滑区模板的浪费造成精度仍然不足。1994 年 Liu 等人 [191] 提出了加权的思想，将 ENO 的所有子模板进行凸组合加权取代原有的选取最光滑的模板的方法，以此来构造光滑区的高精度并保持间断区域 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 [263] 构造了经典的五阶 WENO 格式并给出了光滑因子和非线性权重构造的基本框架。

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

从以上回顾可以看出，空间格式的研究主要关注点是保证间断稳定性情况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，但在在计算如可压缩湍流等问题时，耗散仍然可能过大不足以捕捉小尺度的快波 [152, 331]。另外，WENO 格式本身需要较高的计算量，通过这种方式提高精度往往是得不偿失的。

目前提高光滑区精度主要有两种方法，一种方法是借鉴有近似谱方法分辨特性的紧致格式 [172] 的优点，构造紧致重构 WENO (CRWENO) 格式；另一种方法是结合高精度线性格式构造杂交格式或称混合格式 (Hybrid Scheme)。CRWENO 格式的思想是将低阶紧致模板做 WENO 格式的非线性加权重构得到激波稳定的高阶紧致格式，这部分工作主要见于文献 [73, 101, 151] 等。研究表明 CRWENO 和传统 WENO 格式相比，的确具有更好的小尺度分辨能力 [331]。值得一提的是，2015 年 Peng 和 Shen [225] 在 Shen 等人 [251, 255] 的多步加权 WENO 思想基础上，构造了多步加权的 CRWENO 格式，该格式基于紧致格式的隐式特性，通过改善间断附近过渡点精度来改善全局精度，取得了良好的效果。杂交格式和 CRWENO 格式相比，由于它思想简单，有丰富的选择，因此应

用和研究都更为广泛。杂交格式采用间断识别方法来区分光滑区域和间断区域，然后采用激波捕捉格式和其他低耗散、计算量小的线性格式在不同区域求解，达到兼顾两者优点的目的。常用的杂交格式有混合中心-WENO 格式 [134, 155]，混合紧致-WENO 格式 [227, 234]、混合谱方法-WENO 格式 [61] 等。由于间断识别方法在杂交格式中至关重要，发展间断识别器也是杂交格式研究的一个热门领域。2006 年 Shen 和 Zha [254] 以 WENO-JS 和 WENO-Z 格式的光滑因子为基础，提出了一种无参数的间断识别方法，并且构造了有限紧致格式。

1.3.2.2 近似黎曼求解器

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

通量差分分裂方法基于对精确黎曼求解器的模拟，该类方法又称为 Godunov 类方法，如最经典也最为常用的基于当地 Jacobian 矩阵线化的 Roe 求解器 [238]、基于简单波分解的 Osher 求解器 [221]、基于两波假设的 HLL 求解器 [128] 以及可以模拟接触间断的基于三波假设的 HLLC 求解器 [282]、需要迭代的双激波近似黎曼求解器 [188] 和为了避免红玉现象而提出的旋转混合求解器等。

流通矢量分裂方法基于无碰撞 Boltzmann 方程，因此该类方法也称为 Boltzmann 类方法 [129]，流通矢量分裂方法将相邻单元间的分布函数进行抹平，因此较通量差分分裂有较大的误差，但是由于它们通常形式简单、易于实现，所以仍然有较多的应用。常用的流通矢量分裂方法有 Lax-Friedrichs (LF) 分裂 [166]，Steger-Warming (SW) 分裂 [271] 和 Van-Leer 分裂 [295] 等。

特征分裂方法（特征重构方法）不同于在物理空间进行分裂的 FDS 和 FVS 方法，它的所有分裂和重构都在特征空间进行。在特征空间求得导数的近似后

再变换回物理空间。该类方法具有最好的求解质量，严格保证了局部特征方向，然而由于其过大的矩阵运算，目前仅常用在一维问题的求解中。所有流通矢量分裂的分裂方法都可以应用在特征分裂中。

对流迎风分离压力方法是从 Van Leer 分裂方法发展而来的，它们将无粘通量分裂为与特征速度相关的对流项和与特征声速相关的压力项，对其进行分别处理。该类方法兼具了 FVS 和 FDS 的一些优势，具有 FVS 的简单性和效率，又具有 FVS 的精准性，自 Liou 在 1993 年 [186] 提出以来就得到了广泛的关注和发展。目前应用较为广泛的可以避免“Carbuncle”现象的 AUSM+ 格式 [183, 185]、激波计算稳定的 AUSMDV 格式 [297]，以及结合了它们优点的 AUSMPW [158] 和 AUSMPW+ [157] 格式。以上这些方法由于将总焓从能量方程分出，所以也可以统称为 H-CUSP (Total enthalpy convective upwind and split pressure) 方法，然而从特征值系统看的话，总焓并不能沿着传播方向保持守恒 [326, 326]，而总能却保持守恒，据此 Zha 提出了在对流项使用总能的 E-CUSP 格式 [323, 324, 327]，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，

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x), x(0) = x_0, \quad (1.24)$$

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，到 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 1824 年，Cauchy 为了进行误差估计，在 Euler 方法中引入中间变量，间接的构造了隐式 Euler 格式。但是直到 1955 年才由 Hammer 和 Hollingsworth 在 Radau 格式基础上构造了第一个二阶的隐式 Runge-Kutta 类格式 [118]。

Runge-Kutta 格式并不单指一种格式，而是一系列的总称，如三阶 Runge-

Kutta 就可以有无数种系数组合。1988 年, Shu [262] 根据对流方程解的 TVD 性质, 给出了一组三阶 Runge-Kutta 的系数组合, 该格式被称为 TVD Runge-Kutta 格式。TVD Runge-Kutta 格式在对流方程数值模拟中得到了广泛的应用。

1.4 间断问题数值研究现状和不足

在 1.2 节我们笼统的回顾了一般流体力学的数值方法, 通过这些脉络性的介绍, 我们从单介质流体力学角度了解了 Euler 方程数值求解体系的发展过程, 但是这些介绍远没有触及本文所要关注的间断问题研究现状和遇到的问题。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, WENO 格式改进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。很少有人关注改善激波区域或附近区域精度而直接改善激波的分辨率。

2014 年, Shen 和 Zha [255] 分析了现存的五阶 WENO 格式发现, 在如图 1.1 所示的连接光滑区和间断区的过渡点 $i - 1$, 传统 WENO 格式的精度只有一阶, 激波分辨率不足可能对激波引起的分离流、激波/湍流相互作用等问题的计算结果产生影响。在该文章中, 他们在两个临近四阶模板上构造了两个四阶通量和一个光滑/间断识别器来提高过渡点精度。在更早的工作中 [257], Shen 等人曾提出多步重构的思想, 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。尽管该方法并不能满足极值点五阶收敛的充分必要条件 [132], 但是多步重构的思想仍然有重要的意义。

本文基于 [255] 的研究, 给出了一种新的 WENO 格式构造方法, 该方法结合了 Henrick 的投影函数, 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, 进而改善方法对于激波的分辨率, 第四章对此有详细的研究, 并通过算例验证了该方法在求解和激波相关的问题时, 的确有更好的效果。

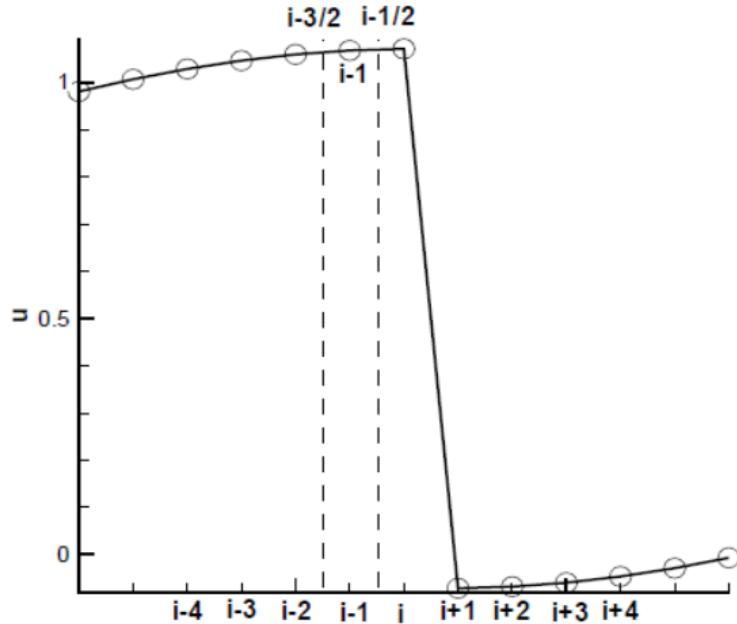


图 1.1: 过渡点示意图 [255]。

1.4.2 物质界面和界面追踪方法

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

1.4.2.1 传统界面

虽然理论上界面存在一定厚度，但在多相流体力学中，由于界面真实厚度只有分子的量级，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。目前，尽管界面方法有多种分类方式 [287]，但是多数学者都将其分为界面追踪方法和界面捕捉方法两类 [28]。

界面追踪方法是借助拉格朗日技术，采用运动网格或标记粒子来实时跟踪界面位置的变化。如锋面追踪(Front-tracking)方法 [71, 287, 289] 和标记(Marker) [230] 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。该类方法的难点是在于对界面破碎和合并的模拟较为复杂 [260, 283]。Particle-in-

Cell (PIC) 方法 [36, 123] 和 Marker-and-Cell (MAC) 方法 [199, 280, 281, 314] 是通过在界面附近引入拉格朗日粒子，然后追踪粒子的运动来跟踪界面位置。粒子类方法是最为古老的界面方法 [199]，但是应用非常有限，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 [289]，除此之外，粒子类方法还难以给出准确的几何界面线(面)。

另一类界面方法完全是基于欧拉技术，该类方法在欧拉网格内引入界面方程的形式来定义界面的位置。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 [220, 248, 276] 采用一个光滑的距离函数，用距离函数为零的位置来定义界面。自从该方法提出后，由于它优美的数学理论、漂亮的计算结果，Level Set 方法得到极为广泛的发展和应用。当然，Level Set 也有诸多不足，如鲁棒性差，重新初始化计算量大，耗散大等，尤其被学者们诟病的是它的守恒性较其它界面方法都要更差。VOF 方法 [135, 164, 316] 也属于欧拉的框架，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 之间则认为该单元跨过界面，通过捕捉体积分数来获得界面位置。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 [244]，但该过程目前仍然过分复杂也难以取得预想的效果。

整体来讲，界面追踪方法更直观，在处理界面的融合和破裂时有其优势；界面捕捉方法更易于实现，在处理界面伴随流场压缩或膨胀时有优势 [179]。将它们彼此结合来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，比如利用粒子方法的守恒性和 Level Set 方法的光滑性的粒子-水平集 (Particle Level Set) 方法 [88, 89]。然而这种结合即增加了方法实现的难度，在复杂问题时也并不那么奏效。

1.4.2.2 耗散界面

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

对于耗散界面，学者主要采用 Cahn-Hilliard 方程 [86, 319] 进行模拟。模拟过渡界面的方法主要有如下几种 [145]，锋面追踪方法 [289] 在界面两侧采用光滑的分布，所以可以追踪耗散界面，然而这种界面厚度主要是由数值耗散造成，并非可控的。Du 等人 [80, 303] 采用三条 level set 线的方法来追踪耗散界面，这种方式并不能得到界面内真实的分布，只能应用在界面厚度变化不大的情况中。还有其它方法，如连续界面力模型 (continuum surface force model) [34]、相场模型 (phase-field) [5, 9] 等。

本文提出一种基于欧拉网格，具有界面追踪思想的粒子方法—双信息保存方法 (Dual information preserving 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

$$\frac{\partial z}{\partial t} + u \frac{\partial z}{\partial x} + v \frac{\partial z}{\partial y} = 0 \quad (1.25)$$

在该方法中，引入两类拉格朗日信息点，分别称为单元点 (Cell-Point) 和粒子点 (Particle-Point) 信息点，单元点限定在单元内运动，粒子点全计算域追踪。在计算开始，每个单元分别在单元中心引入一个单元点和一个粒子点，计算中根据速度场进行位置更新。

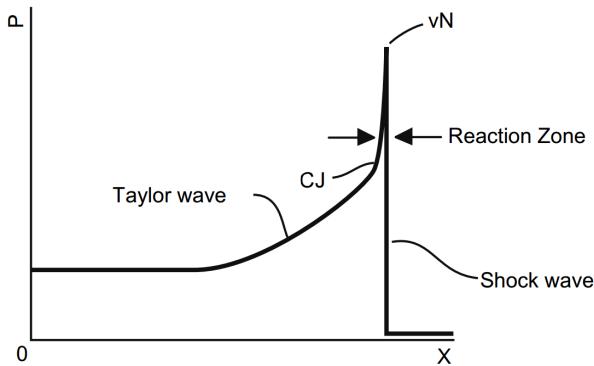
信息点不同于 MAC 方法中的标记粒子，也不同于 PIC 方法中携带全部流体信息的真实粒子。主要有两点区别：

1. 信息点既是虚拟例子，又同时携带有位置信息和对流信息 z 。由于单元点是虚拟的，所以在每一步我们都可以随时生成或抹去；信息点上携带有对流信息 z 又可以用来更新当地节点上的对流值。
2. 信息点是布置在全计算域的，并不是通过追踪信息点来达到追踪界面的目的，而是通过粒子点上的对流信息 z 来捕捉出界面的位置、曲率等各种信息。

该部分工作我们将在第五章进行详细探讨。

1.4.3 气相爆轰波

爆轰波是高速化学反应流和爆炸中常见的一类间断问题，爆轰波的传播是物理化学强耦合过程，是激波和化学反应系统相互作用的结果。随着爆轰波传过，波后反应物随即发生高速的化学反应，形成高温、高压爆轰产物并释放大



量化学反应热用以维持爆轰波的传播，这种过程称为自持爆轰。爆轰过程根据反应物状态可以分为气相、液相和固相爆轰，它们本质上是一致的，但是气相爆轰由于本身机理最为简单，研究也最为丰富，本文只涉及气相爆轰方面的研究工作。

1.4.3.1 爆轰波理论

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

C-J 理论将爆轰波模拟成一维稳态的没有厚度的强间断，反应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 [321], Doring [78] 和 Von Neumann [296] 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 1.2 是一个典型爆轰波压力曲线，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

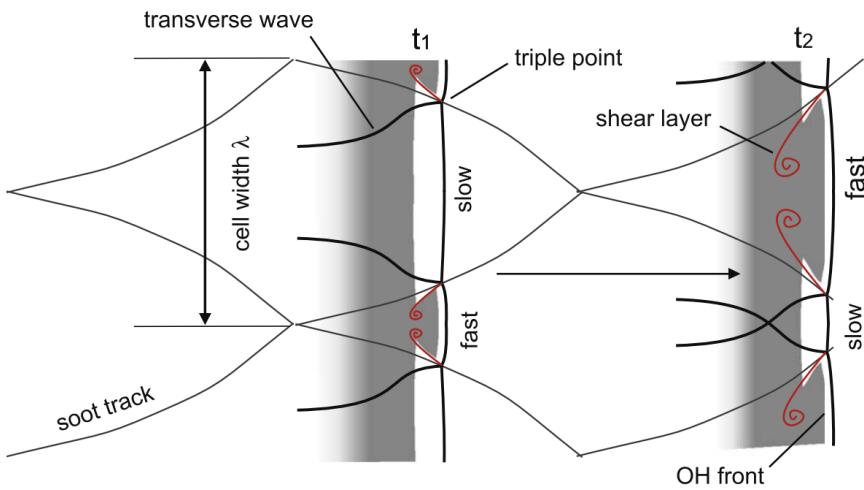


图 1.3: 二维胞格结构示意图 [259]。

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，ZND 理论将爆轰看成一维均匀不可逆的，只能解释一维稳态爆轰结构。实际上，对于几乎所有可燃气体，爆轰波阵面都是本质不稳定的。不稳定性会产生更复杂的一维和高维的物理现象。这种不稳定性主要取决于反应的活化能 $E_a/(RT)$ 。

在一维上，不稳定性会造成爆轰波在传播方向上的脉动振荡，表现为压力峰值随时间在 Von Neuman 峰值附近有规律的上下脉动 [92, 171]。对于活化能较低的爆轰，脉动通常在 $0.8\text{-}1.6P_{vn}$ 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，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，相比如理论分析无法解释不稳定性和空间结构等问题，爆轰波的数值模拟变得更加主流，尤其是采用能反映化学动力学细节的基元反应模型进行

计算，可以定性与定量的再现爆轰波的胞格 [339, 348]、旋转爆轰 [42, 342]、熄火区 [345]、以及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时间尺度和空间的尺度过小的问题，尺度为系统特征的一种度量，详细的解释见附录A。除传统的源项造成的时间刚性外，还可能存在更为复杂的空间刚性问题。除此，还包括组分守恒性和反应区耗散等问题。

1.4.3.2 源项数值刚性问题的时间方法

在高速化学反应流模拟中，经常会遇到化学反应源项存在刚性的问题，这种刚性体现为反应时间尺度远小于流动所采用的时间步长。例如，很多燃烧反应精确计算所需的时间步要精确到纳秒的量级 [209, 268]，在真实计算中，由于计算能力的限制，我们无法将总体的时间步长缩小到该量级。如果采用和对流过程统一的时间方法而不做特殊处理，如采用最常用的显式的 Runge-Kutta 格式时，可能会造成计算不准确或存在较为严重的数值振荡甚至发散。

对于时间尺度差异带来的求解问题，目前主要有两种解决方法。一种方法采用源项点隐 (Point implicit) [81] 或者全隐式的方式 [91] 整体求解，这种方法称为耦合方法。另一种方法通过算子分裂将源项分裂出来，然后采用独立的时间方法和时间步长进行处理，这种方法通常称为解耦的方法。两种方法各有优势，耦合方法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。另外耦合方法由于简化矩阵运算会引入一系列的近似，结果上耦合方法和解耦方法比并不能体现出太多的优势 [160]，因此，目前更多学者都采用解耦方法。

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

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

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x), x(0) = x_0, (x \in \mathbb{R}^s, t \leq 0). \quad (1.26)$$

关于该方程的研究早在 80 年代就已经较为成熟 [116, 305]，最为著名和常用的当属单步的 Runge-Kutta 格式，包括各类显式 RK 和隐式 RK 格式，而且同样可以应用在如对流方程求解中，这在前文对流方程时间方法中有指出，不再赘述。

传统处理刚性 ODE 方程的方法主要包括减小时间步长和采用隐式格式两类方法。如采用刚性不稳定格式在每一步对流步采用很多的子时间步进行稳定的计算，这里由于考虑到计算量通常采用最简单的一阶显式 Euler 格式，时间步长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的步长。采用自适应步长 [153] 避免了固定步长的一系列问题，但是在计算刚性不强的问题上时由于精度不足会存在过大的误差。

隐式类格式通常具有较好的刚性稳定性 [209]，可以构造一致高精度的刚性稳定隐式格式，然而，隐式格式避免不了需要进行大量的收敛迭代和矩阵运算，在求解形式简单的 ODE 方程中鲜有应用。

除上述两类方法外，也有极为稀少的具有显形式的刚性稳定格式，如目前较为常用的线化梯形公式 (linearised Trapezoidal method/LT) [302, 330]，该方法具有二阶精度，且在一定程度上刚性稳定，通常都不需要进行迭代。但是线化梯形公式也仅有二阶精度，相比于对流步的三阶、四阶 Runge-Kutta 时间精度，这远远是不够的。另外，线化梯形公式也并非绝对稳定的，在道刚性更强的计算中，仍可能崩溃。

在本文中的第七章中，基于数值摄动的思想 [98, 317, 334]，构造了仅针对于 ODE 方程的三阶摄动格式，该格式具有显式形式因此无需迭代，具有更好的刚性稳定性，在求解 ODE 方程中较传统格式具有优势。

1.4.3.3 刚性化学反应流动的空间刚性问题

上面我们介绍了源项刚性带来的时间尺度问题，该问题可以通过算子分裂结合有效的 ODE 求解方法来避免。但是如果工况中刚性进一步加大，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 Colella 1986 年的研究 [59] 中。他在数值模拟反应欧拉方程时发现，如果存在间断，如爆轰波，计算结果中经常出现错误的波速和结构。1990 年，LeVeque 和 Yee 发现即便在含源项的线性

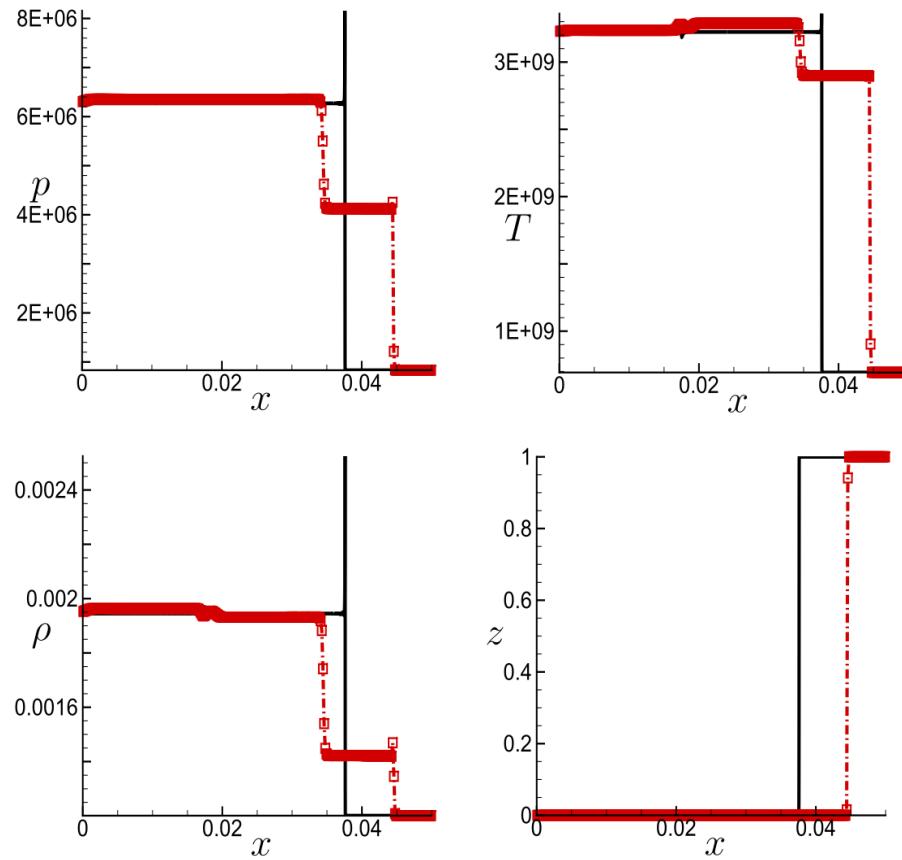


图 1.4: 一个典型的爆轰波虚假传播计算结果 [302]

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得到广泛的关注和研究 [20–22, 44, 302, 330]。图 1.4 给出一组典型的爆轰波虚假传播的计算结果。这一类由于源项刚性而导致爆轰波空间数值求解问题的流动又被称为刚性化学反应流 (Stiff reacting flow)。

刚性化学反应流产生根本原因是由于极快的反应速度造成空间上的反应区域也极为狭窄，化学反应时间尺度和空间尺度间具有复杂的相关性。我们如果采用达到小于反应区域尺度的空间网格来数值模拟自然可以避免所有的空间刚性问题，这种求解通常称为完全求解 (fully resolved)。然而这个尺度往往是达不到的，例如，在尚不存在空间刚性的氢氧爆轰求解中，最理想的求解尺度已经达到 $10^{-7}m$ 量级 [232]，刚性化学反应流的完全求解尺度会更小。因此，我们一般只能采用网格尺度远大于反应尺度的网格进行求解，这种求解称为不完全

求解 (Underresolved) [20]。在不完全求解情况下，如果不采用特殊的方法，我们将无法在网格内追踪反应的传播。格式的耗散不可避免会抹平组分和温度曲线，造成部分反应在激波前激活，这种激活会产生非物理的状态。该状态随着计算累计就会造成虚假传播现象。关于该问题，在正文中会有详细的分析。

2012 年 Wang [302] 对这 20 年关于避免刚性化学反应流中虚假传播现象的研究进行了回顾。Bao 和 Jin 在刚性流假设下，在源项中发展了一种随机投影的方法来捕捉爆轰波 [20–22]，但是该类方法无法应用在无刚性问题中。Zhang 等人提出了一种平衡态的方法 (ESM) [330] 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 HartenENO 子网格重构的思想 [126]，发展了对流步的有限体积 ENO 方法 [44]，Wang 等人 [301, 302] 提出了结合了反应步子网格重构思想的高阶有限差分格式。然而，Yee 等人 2013 年指出 [311]，子网格重构方法和他们自己提出的非线性限制器方法 [313]，只能在一定稀疏的网格和适度的源项刚性情况下推迟非物理传播现象的出现，但是随着网格稀疏或是刚性进一步加强，虚假传播现象仍然会出现。

理论上，在不完全求解情况下，可以将反应面看成反应和未反应两项之间的几何界面，因此可以应用上文所列的各种界面追踪方法进行模拟。如 VOF 方法、Level set 方法以及锋面追踪方法等都曾用来追踪预混火焰面 [208, 229]。也有人尝试采用追踪激波面的方法来抑制虚假传播这一非物理现象 [210]。然而，对于更精细的化学反应模型，由于反应速度并不是恒定的，反应区域中既可能存在刚性区域又存在非刚性的区域，反应面是有有一定厚度和内部结构的，因此界面类方法在化学反应流中，难以有很好的推广。

近些年，有人尝试采用结合了拉格朗日粒子和欧拉背景网格的拉格朗日-欧拉 (Lagrangian-Euler/LE) 方法来求解线性对流-扩散方程 [77, 187, 206, 266]，取得了较好的效果。LE 类方法基本思想是采用适当的算子分裂技术将模型方程分成不同的部分，然后选用欧拉方法或是拉格朗日方法来对应求解 [187]。2007 年 Shipilova 等人 [261] 尝试用一种 LE 方法 (PTM 方法) 求解对流-扩散-反应方程，数值结果显式 PTM 方法即便在很稀疏的网格下也可以有效的抑制数值振荡。这种 LE 的思想并不新颖，实际上所有界面追踪类界面方法都是采用的同样的思想，只是他们仅将拉格朗日粒子或网格用来追踪界面，当时并没有人将这种思想用来直接求解方程本身。目前，这种 LE 方法仅用来求解简单的方

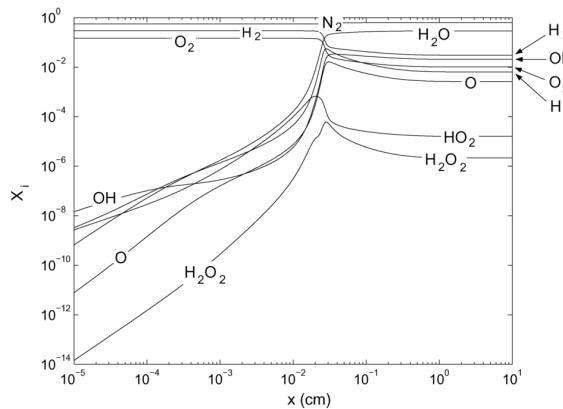


图 1.5: $2H_2 + O_2 + 7Ar$ 反应组分摩尔比变化和激波前沿距离间关系 [232]

程、方程组，尚没有人采用类似的思想求解化学反应方程系统。

在论文中第八章中，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 方法直接求解。由于 DIP 方法的拉格朗日特性，可以追踪界面的连续运动，同时又由于该方法继承了针对于方程本身求解的 LE 思想，对于有反应区域厚度的问题同样可以模拟。通过一些列的算例，我们验证了该方法的有效性。

1.4.3.4 基元反应模型下爆轰波的数值模拟

空间刚性问题一般只出现在总包反应的单方程模型和较为简单的多步反应模型中或是更为严苛的反应条件下。为了更准确的模拟反应动力学过程，我们通常会采用能反映化学动力学细节的基元反应模型进行计算。基元反应模型的求解中，空间刚性问题并不是常见现象，但是其中仍存在空间分辨率不足等问题。实际上，每种组分的反应率相差很大，图 1.5 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 $10^{-4}cm$ 左右，某些曲线如 OH 就开始变化；对于绝大多数组分都在距离诱导激波 $10^{-4}cm$ 和 $10^{-2}cm$ 之间出现变化；到了 $x \approx 10^{-2}cm$ 后所有组分都会有剧烈变化。图 1.6 是通过特征分析给出的化学反应各组分空间尺度和激波前沿距离之间的关系，从中也可以看出，同一空间位置不同组分空间尺度之间差异、同一组分不同空间位置空间尺度同样存在巨大差异。

对于爆轰空间尺度问题，目前除加密网格外，并没有其它特别完善的解决

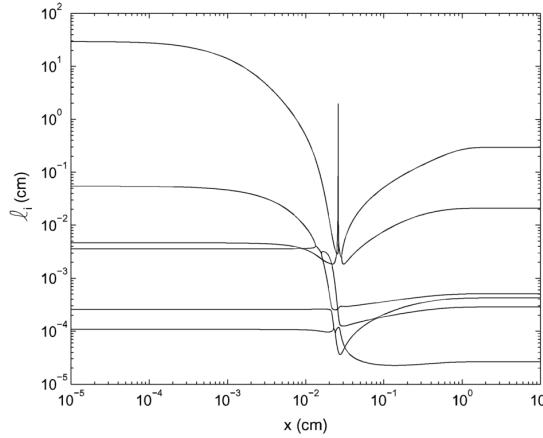


图 1.6: $2H_2 + O_2 + 7Ar$ 反应不同特征值空间尺度和激波前沿距离间关系 [232]

办法。如自适应网格加密技术可以通过在不同空间尺度的区域实时采用不同大小的网格，似乎非常适合爆轰波的计算 [43, 149]，但是目前该类技术在爆轰计算仍有很多困难，因此也并不常用。在固定网格和有限的计算资源下，想要达到完全求解每一空间尺度几乎是不可能的，其中空间尺度较小的组分曲线会由于网格分辨率不足导致的过度耗散而抹平、对应的反应区拉长。爆轰波和激波不同，耗散对于激波而言并不能改变激波前后状态，但是爆轰波组分计算不准确会导致不精确的化学反应结果，得到错误的反应产物，进而影响整体的结果。对此，Powers [232] 等人总结出三点：

- 1) 想要准确预诱导区尺度就需要对引起这一强非线性现象的物理问题在恰当的尺度合理的求解。但是目前没有发现任何文献对诱导区尺度做过网格收敛分析，所以很难说这些物理问题是否被合理求解了。
- 2) 对于弯曲的爆轰波，新的几何尺度会和反应区尺度竞争决定整体的波动特性。能否准确的捕捉爆轰波的多维问题很大程度取决于对于反应区尺度和曲率尺度等物理问题的准确计算。
- 3) 在非定常的计算中，任何瞬态爆轰波的高波束波长应该和定常结构中的最佳特征尺度在同一量级。在任何情况下，尤其是在非稳定问题中，想要完全捕捉非定常动力学过程，所用的长度尺度需要等于或者小于最佳定常空间尺度。

和刚性化学反应流问题相似，我们无法采用欧拉方法在不完全求解下准确计算化学反应组分，但是我们可以通过拉格朗日-欧拉的思想进行计算来消除由

于网格不足产生的数值耗散的影响。基于这样的考虑，在第九章，我们将 DIP 方法推广到基元反应模型下的爆轰波模拟中，结合算子分裂方法将方程分裂为 Euler 方程部分、组分对流部分和源项部分，针对每一部分的特征分别采用欧拉体系的高精度方法、拉格朗日体系的 DIP 方法和数值摄动方法进行求解。数值结果表明新的方法能准确的计算如爆轰波速等问题，并且相比于传统方法在组分守恒性，组分曲线的耗散性上有更大的优势。

1.5 本文所开展研究内容

本文研究内容主要分为上下两部分。在上部分中，我们研究欧拉方程激波相关的空间方法，包括

- 1) 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) 针对混合格式的关键问题—间断识别，我们对比了现存的大部分识别方法，认为基于 τ_5 函数的 SZ 识别方法无人为参数，方便使用，且有较好的表现，是本文最推荐的识别方法。
- 3) 本文将采用了 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。

区别与上部分的纯欧拉体系的方法，下部分内容主要是欧拉-拉格朗日结合的方法，包括以下内容：

- 1) 由于传统界面方法无法处理耗散界面、界面守恒性不好等问题，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，并验证了该方法良好的守恒性。
- 2) 本文结合避免界面附近振荡的虚拟流体方法，将双信息保存方法应用在两相流界面问题求解中，取得了较好的结果。
- 3) 针对于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。

- 4) 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现象, 本文将双信息保存方法应用在刚性化学反应流求解中, 通过抑制组分对流方程耗散来避免这一非物理的数值现象。
- 5) 在应用了基元反应模型的化学反应求解中, 由于组份之间尺度相差很大, 在求解网格不够精细情况下, 经常遇到某些反应速度快的组分求解不准确的问题。本文将双信息保存方法应用在基元反应的反应欧拉方程求解中, 由于该方法的拉格朗日特性, 即便在较稀疏网格也能很好的计算组分对流过程, 保持组分求解的守恒性。

第二章 多步加权基本无振荡 (Multi-WENO) 格式

加权基本无振荡格式 (WENO) 自 1994 年由 Liu [191] 提出以来，在这 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 [127] 的最光子滑模板用所有子模板的凸组合重构代替。在 WENO 格式构造中，子模板权重函数的选取对格式的精度和无振荡的保持都十分重要。

Jiang 和 Shu [150] 分析了 Liu [191] 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 [132] 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 [30] 建议采用整体的五点模板来推导光滑因子取代 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 [18, 100, 304]。如 Martin 等人 [198] 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 ($f'_i = 0$)。因此，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 [255] 分析了现存的各种五阶 WENO 格式，发现这些格式在过渡点半点精度只有三阶。这一缺点可能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，该点的半点通量可以达到四阶精度。换言之，可以通过四个点的光滑模板来构造一个四阶半点通量。在 [255] 工作中，Shen 和 Zha 引入了两个四阶的通量和一个判断相邻两个四阶通量光滑/间断的判别器用来提高精度。Shen 等人在更早的工作中 [257]，指出 Jiang 和 Shu 的经典的光滑因子 IS_K 在极值点不能满足 $\beta_k = D(1 + O(\Delta^2))$ ，并提出一种逐阶的重构来满足上述条件。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 [132]。

本章我们基于 [255] 的分析，构造了一种新形式的 WENO 方法。该方法结

合了 Hentick 的映射函数、WENO-Z 格式以及多步的构造方法。新方法的优点主要是提高了 WENO 格式在近激波区域的精度。数值算例显示该方法比前文提到的各种五阶 WENO 格式耗散都要第。

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的表达，这些方法也会在后文中经常应用到。

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，在流通矢量分裂中，LF 分裂方法是形式最为简单、最为常用的一种 [18, 30, 234]，具有较好的稳定性。

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

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

LF 方法给出的正负通量为

$$f^\pm(u) = f(u) \pm \lambda_{max} u, \quad (2.2)$$

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

采用 Godunov 方法可以实现空间和时间的独立离散，所以 Godunov 方法通常也称为半离散方法。方程 (??) 的空间半离散形式为

$$\frac{du_i(t)}{dt} = -\frac{1}{\Delta x}(h_{i+1/2} - h_{i-1/2}), \quad (2.3)$$

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'+'， $h_{i+1/2}^-$ 的构造遵从同样的规律。

2.1.2 加权基本无振荡/WENO 格式 [30, 132, 151]

五阶 WENO 格式的通量构造为

$$h_{i+1/2} = \sum_{k=0}^2 \omega_k q_k, \quad (2.4)$$

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

$$\begin{cases} q_0 = \frac{1}{3}f_{i-2} - \frac{7}{6}f_{i-1} + \frac{11}{6}f_i, \\ q_1 = -\frac{1}{6}f_{i-1} + \frac{5}{6}f_i + \frac{1}{3}f_{i+1}, \\ q_2 = \frac{1}{3}f_i + \frac{5}{6}f_{i+1} - \frac{1}{6}f_{i+2}. \end{cases} \quad (2.5)$$

模板权重 ω_k 为

$$\omega_k = \frac{\alpha_k}{\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2}, \quad (2.6)$$

其中

$$\alpha_k = \frac{c_k}{(\varepsilon + IS_k)^p}, \quad (2.7)$$

IS_k 是子模板 S_k^3 的光滑度量因子。在文献 [150] 中, Jiang 和 Shu 建议 IS_k 选取为

$$IS_k = \sum_{l=1}^2 \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \Delta x^{2l-1} \left[q_k^{(l)}(x) \right]^2 dx. \quad (2.8)$$

Eq.(??) 的泰勒展开为

$$\begin{cases} IS_0 = \frac{13}{12}(f_{i-2} - 2f_{i-1} + f_i)^2 + \frac{1}{4}(f_{i-2} - 4f_{i-1} + 3f_i)^2, \\ IS_1 = \frac{13}{12}(f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1})^2 + \frac{1}{4}(f_{i-1} - f_{i+1})^2, \\ IS_2 = \frac{13}{12}(f_i - 2f_{i+1} + f_{i+2})^2 + \frac{1}{4}(3f_i - 4f_{i+1} + f_{i+2})^2, \end{cases} \quad (2.9)$$

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 $f'_i = 0$, Eq.(??) 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 [30, 132, 257]。

Henrick 等人 [132] 给出了关于 Jiang 和 Shu 的 WENO 格式详细的精度分析，并且认为满足五阶收敛需要满足如下的条件

$$\sum_k = 0^2 A_k (\omega_k^+ - \omega_k^-) = O(\Delta x^3), \quad (2.10)$$

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

其中 A_k 为 q_k 的泰勒展开中的三阶项 (Δx^3) 系数 [132]。为了满足前面的条件，提高权重系数 ω_k 的系数，映射函数 $g_k(\omega)$ 定义为

$$g_k(\omega) = \frac{\omega(c_k + c_k^2 - 3c_k\omega + \omega^2)}{c_k^2 + \omega(1 - 2c_k)}, \quad (2.11)$$

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

Borges 等人 [30] 提出一个五阶收敛的充分条件

$$\omega_k^\pm - c_k = O(\Delta x^3), \quad (2.12)$$

并引入了一个系数 τ_5

$$\tau_5 = |IS_0 - IS_2|, \quad (2.13)$$

用 τ_5 来构造新的光滑因子

$$IS_k^z = \frac{IS_k + \varepsilon}{IS_k + \tau_5 + \varepsilon}, \quad (2.14)$$

通过新的 IS_k^z 构造的 WENO 格式—WENO-Z 格式，可以在极值点满足条件 (??)。

在本文所有用到 ε 的公式中，该系数都是为了防止分母为零，在文章 [150] 中， $\varepsilon = 10^{-6}$ ，在文章 [30, 132] 中， $\varepsilon = 10^{-40}$ 。Eq.(??) 中的 p 作用是增加间断区权重间的差距。

2.1.3 Runge-Kutta 时间方法

在引言1.3.2.3中我们简单回顾了对流方程的各种时间方法的发展，目前应用最为广泛的是 Shu 根据对流方程 TVD 性质发展的一套三阶显示 Runge-Kutta 格式 [263]。对于如下方程

$$\frac{du}{dt} = L(u), \quad (2.15)$$

三阶 TVD Runge-Kutta 格式具体表达如下，

$$\begin{cases} u^{(1)} = u^n + \Delta t L(u^n), \\ u^{(2)} = \frac{3}{4}u^n + \frac{1}{4}u^{(1)} + \frac{1}{4}\Delta t L(u^{(1)}), \\ u^{n+1} = \frac{1}{3}u^n + \frac{2}{3}u^{(2)} + \frac{2}{3}\Delta t L(u^{(2)}). \end{cases} \quad (2.16)$$

2.2 过渡点精度分析

[255] 过渡点是连接光滑区和间断去的网格点，在前言1.4.1中有较详细的图示和描述。在文献 [255] 中分析了五阶 WENO 格式在过渡点降阶问题，认为无论是 WENO-Z 格式还是 WENO-JS 格式在过渡点只有三阶精度，然而该分析存在一些错误，其实该点只有二阶精度，以下我们将给出更为准确的分析，其中括号内为原不准确的表述。

图1.1中，点 i 和点 $i+1$ 是两个间断点，点 $i-1$ 即被称作过渡点，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

$$IS_2 >> IS_0, IS_1.$$

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 $i+3$ 。

由于过渡点仍然属于光滑区域，因此该点的半点通量应该达到四阶和五阶，而一阶导数精度应该达到三阶（[255] 中为四阶）。

为了提高过渡点的精度，在文献 [255] 中，构造了一个新的方法

$$h_{i+1/2} = \begin{cases} q_0^4, & \text{if } \tau_4^0 \leq \min(IS_k) \text{ and } \tau_4^1 \geq \min(IS_k), \\ q_1^4, & \text{if } \tau_4^1 \geq \min(IS_k) \text{ and } \tau_4^0 \leq \min(IS_k), \\ h^{\text{WENO-Z}}, & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (2.17)$$

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 (??) 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

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

其中 τ_4^0 和 τ_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 Eq.(??) 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 [255]。

2.3 WENO 格式的多步加权方法

不同于 Eq.(??) 中的方法，本文中，我们构造结合了 Henrick 映射函数 [132] 和逐步提高精度阶的 WENO-Z 格式思想 [257]，构造了一种新型的多步加权 WENO 方法。图.??可以用 来说明该方法。

第一步，构造如下两个四阶的加权通量

$$\begin{cases} h_0^4 = \omega_0^{4,0} q_0 + \omega_1^{4,0} q_1, \\ h_1^4 = \omega_0^{4,1} q_1 + \omega_1^{4,1} q_2, \end{cases} \quad (2.18)$$

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 Eq.(??) 中相同。

第二步，通过以下方式构造最终的五阶模板

$$h_{i+1/2} = \omega_0 h_0^4 + \omega_1 h_1^4, \quad (2.19)$$

其中,

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

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

下面我们分析新的方法 Eq.(??, ??) 的精度, 通过泰勒展开可以得到

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

和

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

应用合适的映射函数 $g_k(\omega)$

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

容易发现

$$\omega_k^{4,l} = \begin{cases} c_k^{4,l} + O(\Delta x^6), & \text{if } f'_i \neq 0, \\ c_k^{4,l} + O(\Delta x^3), & \text{if } f'_i = 0 \text{ and } f''_i \neq 0, \end{cases} \quad (2.20)$$

同样可以得到

$$\omega_k = \begin{cases} c_k^5 + O(\Delta x^9), & \text{if } f'_i \neq 0, \\ c_k^5 + O(\Delta x^3), & \text{if } f'_i = 0 \text{ and } f''_i \neq 0, \end{cases} \quad (2.21)$$

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 (??)。因此多步加权过程 Eq.(??) 和 Eq.(??) 在光滑区没有发生降阶。

如果 x_i 是过渡点（例如，间断介于点 x_{i+1} 和点 x_{i+2} 之间）。在第一步通过 Eq.(??) 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 Eq.(??) 中有 $\omega_1 \rightarrow 0$ ，最后的 $h_{i+1/2} \rightarrow h_0^4$ 。因此，过渡点将有三阶精度。

要说明的是，计算 Eq.(??) 和 Eq.(??) 比起 WENO-Z 或者 WENO-M 都需要更多的计算量，这是由于它需要同时采用 WENO-Z 和 WENO-M 来求解六个权重系数。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

$$h_{i+1/2} = \begin{cases} h_{i+1/2}^{\text{present}}, & \text{如果模板 } S_i^5 \text{ 是间断模板,} \\ h_{i+1/2}^{\text{other}}, & \text{其它,} \end{cases} \quad (2.22)$$

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分析。

2.4 数值算例

2.4.1 线性对流算例

线性对流问题的控制方程如下，

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} = 0, & -1 \leq x \leq 1, \\ u(x, 0) = u_0(x), & \text{周期边界条件.} \end{cases} \quad (2.23)$$

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.?? 给出了误差和精度。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。

2. 初始条件

$$u_0(x) = \begin{cases} -\sin(\pi x) - \frac{1}{2}x^3, & -1 < x \leq 0, \\ -\sin(\pi x) - \frac{1}{2}x^3 + 1, & 0 < x \leq 1, \end{cases} \quad (2.24)$$

表 2.1: 不同格式精度对比, $T = 2$

| Scheme | N | L_1 error | L_1 order | L_∞ error | L_∞ 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 |

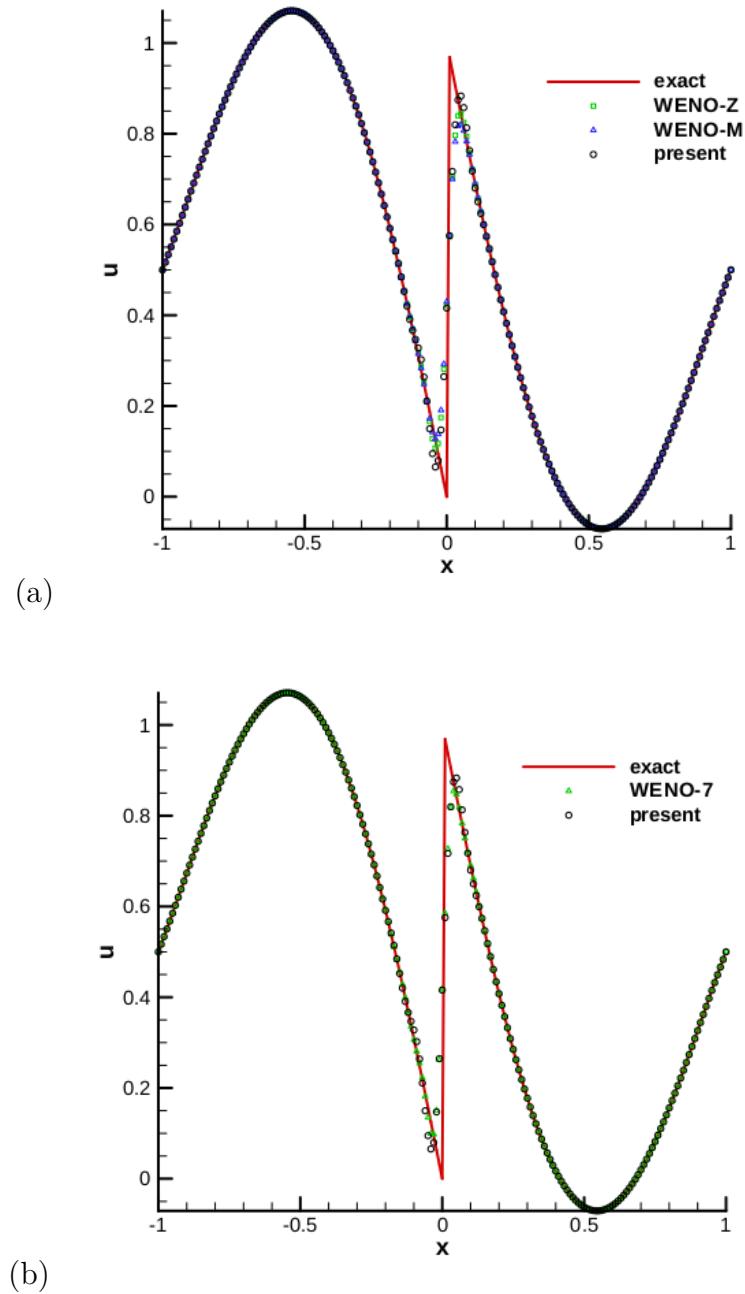
图.??(a) 中给出的是 $N = 200$ 网格点在 $t = 6$ 时刻的结果, 可以看出, 在间断附近, 新的方法得到的结果较 WENO-Z 或 WENO-M 都有更好的表现。图.??(b) 给出的是当前格式和七阶 WENO (WENO-7) [18] 格式结果对比, 可以看到, 新的格式在间断附近的计算结果比 WENO-7 都要好。这也符合 ??中的分析, 在过渡点 $i - 1$, WENO-7 和新格式都有三阶精度, 但是在点 $i - 2$ WENO-7 只有三阶精度, 而新的格式有五阶精度。

3. 初始条件

$$u_0(x) = \begin{cases} \frac{1}{6} (G(x, \beta, z-\delta) + G(x, \beta, z+\delta) + 4G(x, \beta, z)), & -0.8 \leq x \leq -0.6, \\ 1, & -0.4 \leq x \leq -0.2, \\ 1 - |10(x - 0.1)|, & 0 \leq x \leq 0.2, \\ \frac{1}{6} (F(x, \alpha, a-\delta) + F(x, \alpha, a+\delta) + 4F(x, \alpha, a)), & 0.4 \leq x \leq 0.6, \\ 0, & \text{otherwise}, \end{cases} \quad (2.25)$$

其中

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

图 2.1: 初始条件 Eq.(??) 下计算结果对比, $t = 6$.

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

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。图.??(a) 和图.??(b) 中给出了新格式和五阶 WENO-Z 以及 WENO-M 格式对比结果。可以看到新方法的确可以提高间断附近的数值表现。在图.fig:linear3(a) 和图.??(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有更好的表现。

2.4.2 非线性对流算例

非线性对流算例采用的控制方程为无黏 Burgus 方程

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

初始条件为

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

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.() 给出在 $N = 80$ 网格下 $t = 2$ 时刻计算结果，可以看到相比与 WENO-Z 和 WENO-M，新的格式在间断附近的结果更接近间断解。

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，一维的方程更为简化

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = 0, \quad (2.27)$$

其中 $U = (\rho, \rho u, \rho E)^T$, $F = (\rho u, \rho u^2 + p, u(E + p))^T$ 。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

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

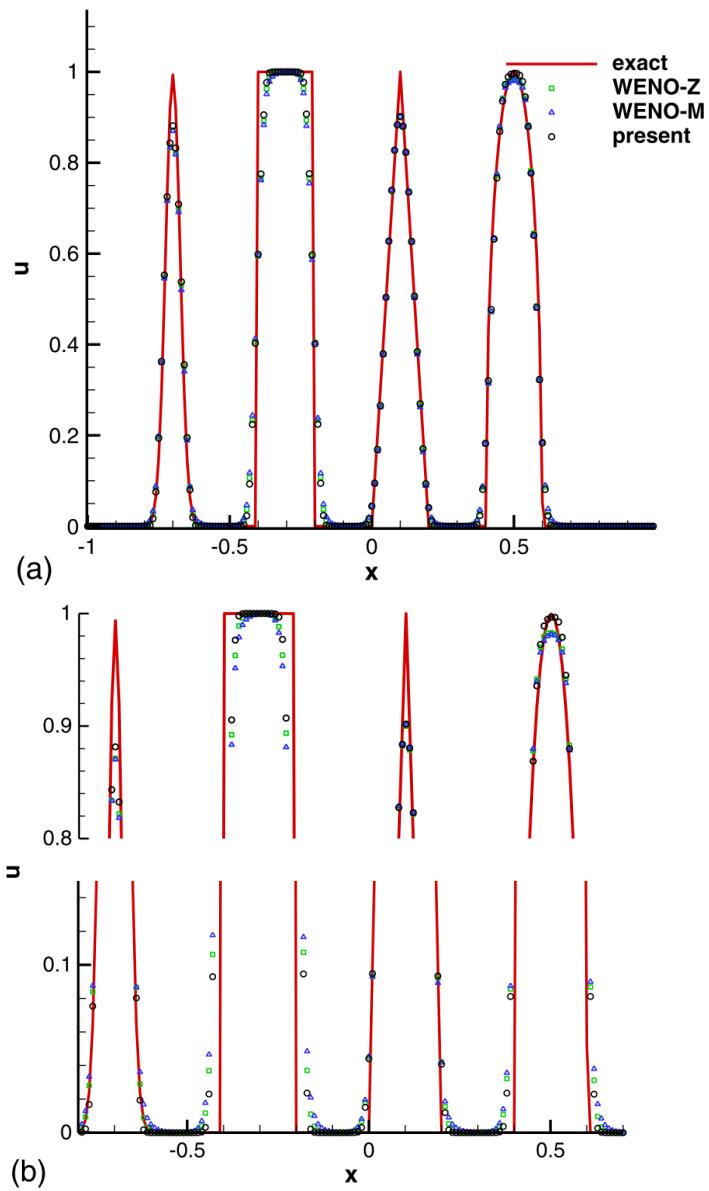


图 2.2: (a) 初始条件 Eq.(??) 下计算结果对比, $t = 6$. (b) 图.??(a) 的局部放大图.

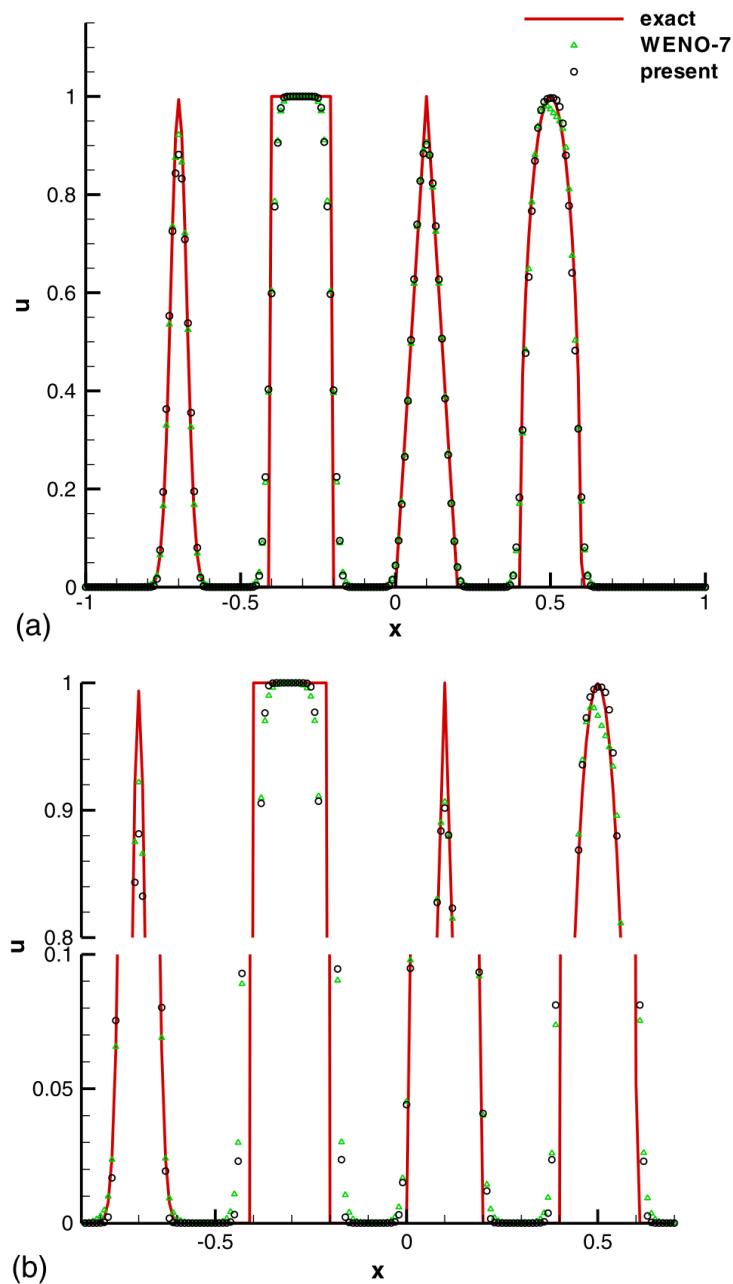


图 2.3: (a) 初始条件 Eq.(??) 下计算结果对比, $t = 6$. (b) 图.??(a) 的局部放大图.

图. 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

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

图. 给出了在 $N = 200$ 网格下 $t = 1.3$ 时刻的计算结果。在 Sod 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 的激波和一道正弦的熵波相互作用 [264]。图. 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 $N = 2000$ 网格下得到的。可以看到采用了新格式，即便是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. 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是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. 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。

2.4.4 二维对流传播方程

二维线性对流传播方程为

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} = 0, & -1 \leq x, y \leq 1, \\ u(x, y, 0) = u_0(x, y), \end{cases} \quad (2.28)$$

初始条件为 $u_0(x, y) = \sin(\pi(x + y))$, 采用周期边界条件。表. 中给出了不同格式的误差, 可以看到对于光滑算例, 三种方法都能达到和一维中一样的五阶精度。

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, $T = 2$

| Scheme | N | L_1 error | L_1 order | L_∞ error | L_∞ 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 二维变系数线性对流守恒方程算例

本算例采用的二维线性对流守恒率方程为

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(-yu)}{\partial x} + \frac{\partial(xu)}{\partial y} = 0, \quad -1 \leq x, y \leq 1, \quad (2.29)$$

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) [57, 252]。图. 给出了在 200×200 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 [150]。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，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：

$$\begin{cases} = \varepsilon \tau e^{\alpha(1-\tau^2)} \sin \theta \\ v = -\varepsilon \tau e^{\alpha(1-\tau^2)} \cos \theta \\ T = -\frac{(\gamma-1)\varepsilon^2 e^{2\alpha(1-\tau^2)}}{4\alpha\gamma} \\ S = 0 \end{cases}$$

其中， $\tau = r/r_c$, $r = \sqrt{(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2}$, ε 代表涡的强度， α 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 [150, 254] 中相同的值， $\varepsilon = 0.3$, $r_c = 0.05$, $\alpha = 0.204$ 。

计算时间步选取为 $[] <++>$

$$\Delta t = \sigma \frac{\Delta t_x \Delta t_y}{\Delta t_x + \Delta t_y}, \text{ 其中 } \Delta x_t = \frac{\Delta x}{\max_{i,j}(|u_{i,j}| + c_{i,j})}, \Delta y_t = \frac{\Delta y}{\max_{i,j}(|v_{i,j}| + c_{i,j})}, \quad (2.30)$$

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

图给出新方法在 $t = 0.6$ 时刻计算结果中的压力分布，图给出中轴线 $y = 0.5$ 上的压力曲线对比结果。计算采用 251×101 的网格，其中参考解 ‘exact’ 为 WENO-Z 格式在 2001×401 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。

图给出新方法在 251×101 , 501×201 和 1001×401 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。压力峰值的微小差异也表明，即便在粗糙网格下该方法也只有非常小的耗散。

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性。该算例我们求解二维 Navier-Stokes 方程

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} = \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial F_v}{\partial x} + \frac{\partial G_v}{\partial y} \right) \quad (2.31)$$

其中，

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

$$F_v = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ u\tau_{xx} + v\tau_{xy} + q_x \end{pmatrix}, \quad v = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yy} \\ u\tau_{xy} + v\tau_{yy} + q_y \end{pmatrix}$$

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

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

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

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 $Pr = 0.72$, 雷诺数 $Re = 500$ 。黏性项采用四阶中心格式，网格如文献统一采用 321×81 , 时间步长同样通过公式

(??) 求得。图给出密度分布，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。

2.5 小结

结合 Henrick 的映射函数和逐阶加权 WENO-Z 的思想，本文构造了一种新形式的 WENO 格式。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形式格式在光滑区甚至是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。

第三章 间断识别方法比较研究

为了能更准确的模拟可压缩流中复杂的激波和其它流场结构相互作用，如激波/边界层、激波/涡等，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光滑区的小尺度结构 [228]。在上一章中，我们提出了多步加权的思想，并构造了多步加权五阶 WENO 格式，进一步改善了 WENO 格式在间断附近的表现，从算例中我们也能看出 WENO 格式可以求解各种和强间断相关的问题所表现出的准确性和鲁棒性。

尽管 WENO 格式在理论上可以构造到任意阶精度 [18, 100, 150]，然而近些年研究发现，在求解短波时，尤其在可压缩湍流的计算中 [331]WENO 格式会存在过度的耗散以至掩盖了真实的物理黏性，造成计算的不准确。为了避免这一问题，学者们发展了一系列杂交格式 (hybrid method)，如 WENO-紧致格式 [227, 234, 254, 335]，WENO-中心格式和 WENO-迎风格式等，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。对于杂交格式，最为关键的问题是准确的识别激波。

最近，Li 和 Qiu [178] 在 WENO-迎风格式中比较了多种间断识别方法，并且通过算例证明杂交格式比起 WENO 格式更为高效。Shen 和 Zha 在有限紧致的工作 [254] 中构造了一种基于 WENO-Z 格式光滑因子提出的激波识别方法。该识别方法无人为的或和问题相关的自由参数，有效性在文 [254] 中得到了验证。

在本章中，我们系统的研究、比较不同间断识别器，包含文 [178, 254, 336] 中的识别方法。

3.1 有限紧致格式 (the finite compact scheme)

本文将各种识别方法应用在有限紧致格式 [254] 来验证它们的表现。有限紧致格式 (the finite compact scheme) 是一种结合了 WENO 格式和紧致格式的杂交格式，有限紧致格式将间断看成流场的内边界，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：

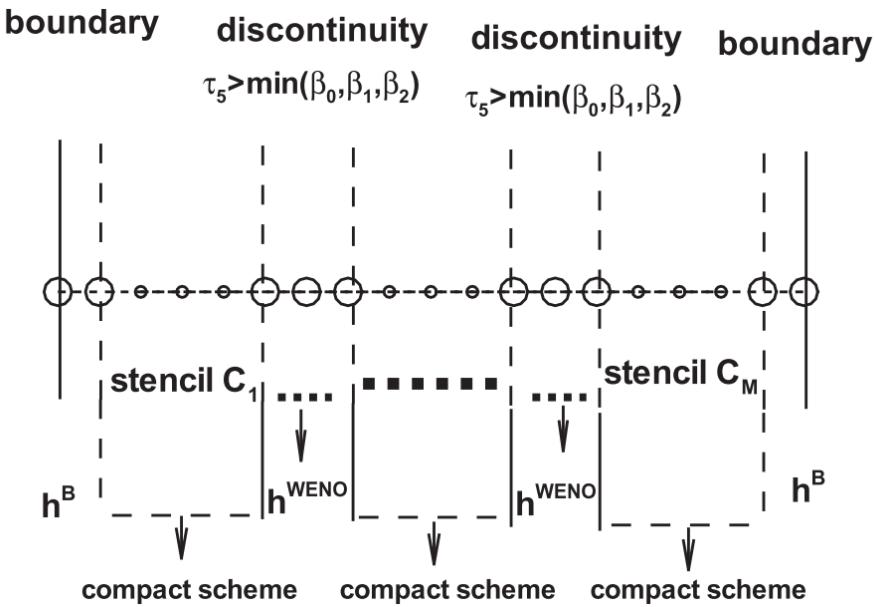


图 3.1: 有限紧致格式示意图

- (1) 首先通过间断识别方法识别出间断区域，该区域包括边界都采用 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）的光滑节点定义为紧致模板，并采用紧致格式构造紧致模板上的通量。

注意在第 (2) 步，第 (1) 步中构造的间断区域模板通量将自动的作为内边界。

图 (?) 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

3.2 间断识别方法

3.2.1 τ_5 识别方法 [254]

在 [254] 有限紧致格式采用的是 Shen 和 Zha 提出的一种基于 WENO-Z 格式光滑度量因子的间断识别方法。为了简便本文称其为 SZ 识别方法。

Borges 等人 [30] 在 WENO-Z 构造中引入了一个 τ_5 系数, 如公式 (??) 中所示。Shen 和 Zha [254] 指出, τ_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 $\tau_5 \ll IS_k$ ($k = 0, 1, 2$)。
- (2) 如果在 S^5 模板上存在间断但是在子模板 S_k^3 上光滑, 则对于光滑子模板有 $IS_k \ll \tau_5$ 。
- (3) $\tau_5 \leq \max(IS_0, IS_1, IS_2)$ 。

根据这些性质可以得到如下的间断判别方法:

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) 识别方法

对于平均总变差方法我们采用和 [178, 233, 336] 中相同的缩写 ATV, 其中 TV 代表 t_n 时刻的总变差

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

如果

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

则认为 $[x_j, x_{j+1}]$ 内存在间断。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, θ 为问题相关参数, 它的选择对识别方法的效果影响很大, 本文统一选用 $\theta = 0.3$ 。

3.2.3 基于 minmod 函数的 TVB 识别方法 [56]

为了便于表达, [178] 中在单元 I_j 上给出了一个二次多项式 $P_2(x)$

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

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

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

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 [56] 中 M 为初始解光滑区域的二阶导数最大值成正比的设定：

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

3.2.4 XS 识别方法 [309]

Xu 和 Shu 在文章 [309] 中引入了一个强间断判别方法，该方法中定义了一个 ϕ_j 函数

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

其中

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

这里 ε 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 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 $\gamma_j \ll \beta_j$ ， ϕ_j 趋近于 1。因此，本文中我们认为 $\phi_j > (\Delta x)^2$ 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 [26] (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 ?? 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 间断识别器 [163]

KXRCF 间断识别方法将单元 I_j 的边界分为入流边界 ∂I_j^+ 和出流边界 ∂I_j^- 两部分，如果

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

则认为 I_j 单元为间断单元。这里 h_j 定义为单元 I_j 的半径， $I_{n,j}$ 为单元 I_j 出流边界 ∂I_j^- 的邻居单元。本文中上面公式 ?? 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 ??) 和三阶 Runge-Kutta 时间方法 (章节 ??)。

3.3.1 线性对流算例

该算例和算例 ?? 类似, 分别测试一个组合波算例一个光滑正弦函数算例。控制方程为 (??)

1. 初始条件

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

该算例是完全光滑的, 如果一个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, 会有越多的点当成间断点计算, 也就越接近 WENO-Z 的结果。通过该算例我们可以验证不同间断识别方法对于光滑区误识别的问题。在表 ?? 中我们给出了 WENO-Z 格式、紧致格式、结合了不同识别方法的有限紧致格式结果的 L_∞ 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, 而 SZ 识别方法结果和紧致格式相同。

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

| 识别方法 | L_∞ 误差 | 识别方法 | L_∞ 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 |

2. 组合波算例初始条件为 ??, 该算例中包含高斯波、方波、三角波和椭圆波, 用来验证识别方法对于间断问题的识别能力, 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 ?? 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

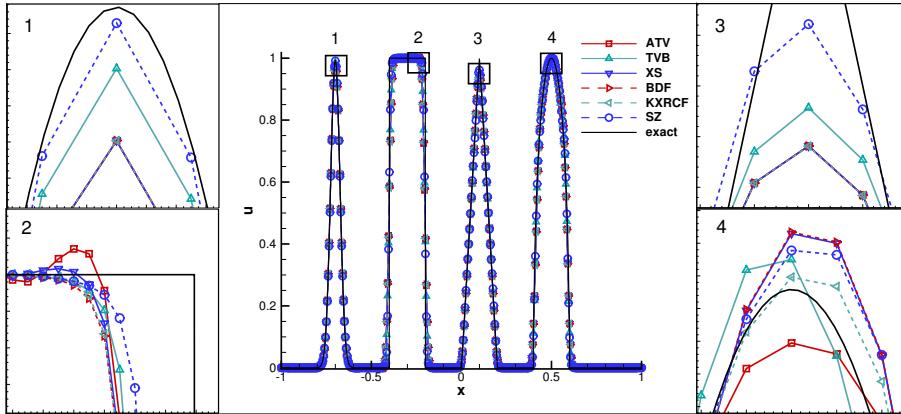


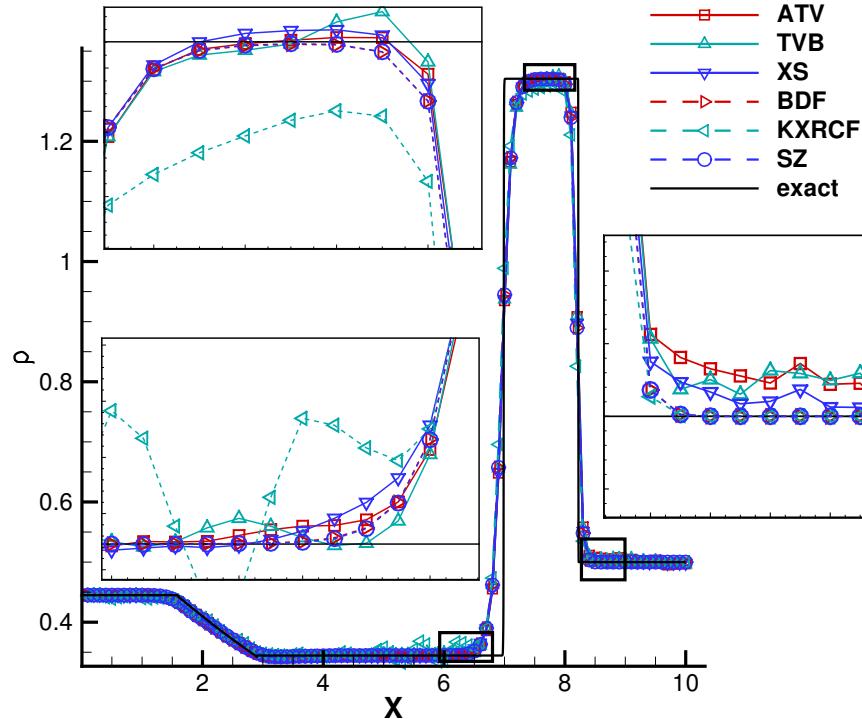
图 3.2: 有限紧致格式结合不同识别方法的组合波计算结果, $t = 8.0$

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

该部分采用和章节 ?? 相同的一维欧拉方程 (??), Lax 激波管算例、Shu-Osher 激波管算例及冲击波相互作用算例。

1. Lax 激波管算例图 ?? 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 激波管算例图 ?? 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. 冲击波相互作用算例图 ?? 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, 在波峰 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。在波谷 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。

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, $t = 1.3$

3.3.3 二维算例

接下来我们考虑二维 Euler 方程 (1.1) 算例。

1. 二维黎曼问题算例

在前言 1.2.2 中我们曾讨论过二维黎曼问题研究现状。由于该类问题具有简单的二维结构, 学者们经常用它们做数值测试算例。我们知道, 二维黎曼问题有多达 19 种, 其中某些在数值计算中较为常用 [?]. 我们选取其中一种, 初始条件为

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

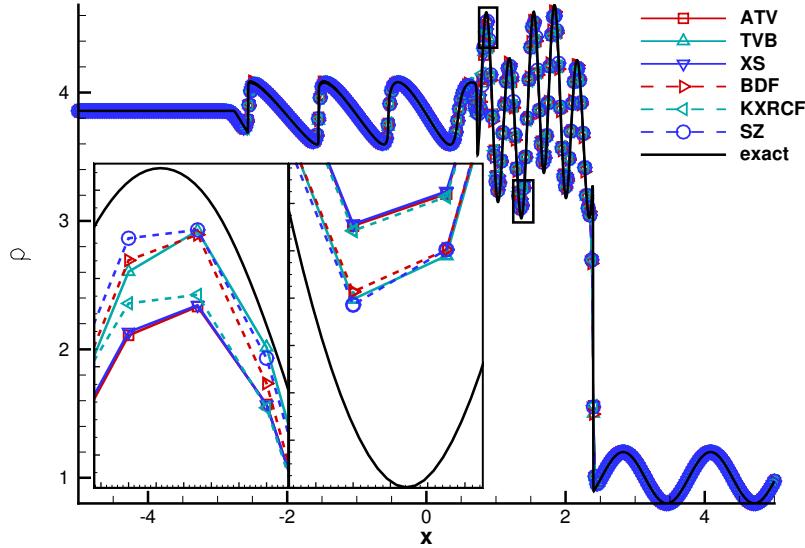


图 3.4: Shu-Osher 激波管算例, 有限紧致格式结合不同识别方法, 密度曲线, $t = 1.8$

计算时间为 $t = 0.8$, 图 ?? 给出有限紧致格式结合不同识别方法的计算结果和局部方法图, 计算网格为 400×400 , 对比算例为采用 WENO 格式分别在 400×400 和加密的 800×800 网格下计算结果。可以看到, 采用了 SZ 识别方法可以获得最为精细的计算结果, 识别出更多的小尺度结构, 其中 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, 计算结果较纯粹的 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, 甚至比采用纯粹的 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 [307], 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 $[0, 4] \times [0, 1]$ 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 60° 安置在 $x = \frac{1}{6}, y = 0$, 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。波前采用 $\rho = 1.4, p = 1$ 。计算时间为 $t = 0.2$, 该算例中我们只采用上面算例中无振荡的四中激波识别方法。图 ??

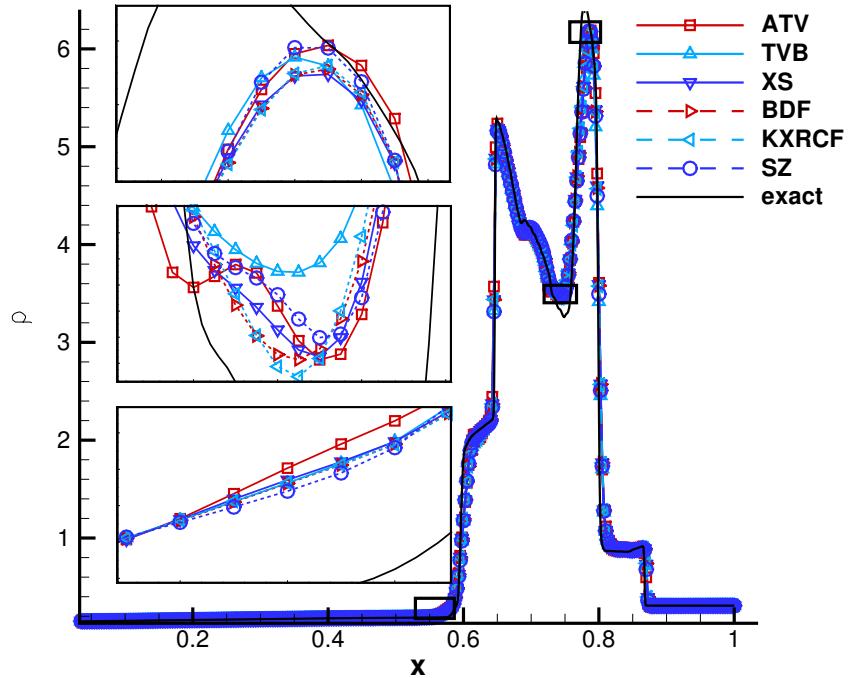


图 3.5: 冲击波相互作用算例, 有限紧致格式结合不同间断识别方法, 密度曲线, $t = 0.038$

给出了密度结果及放大图。从中我们可以看到 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, 对它们的表现进行了一系列的数值比较。最终我们认为基于 WENO-Z 格式 τ_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, 如下一章中的理想磁流体流动高精度稳定求解。

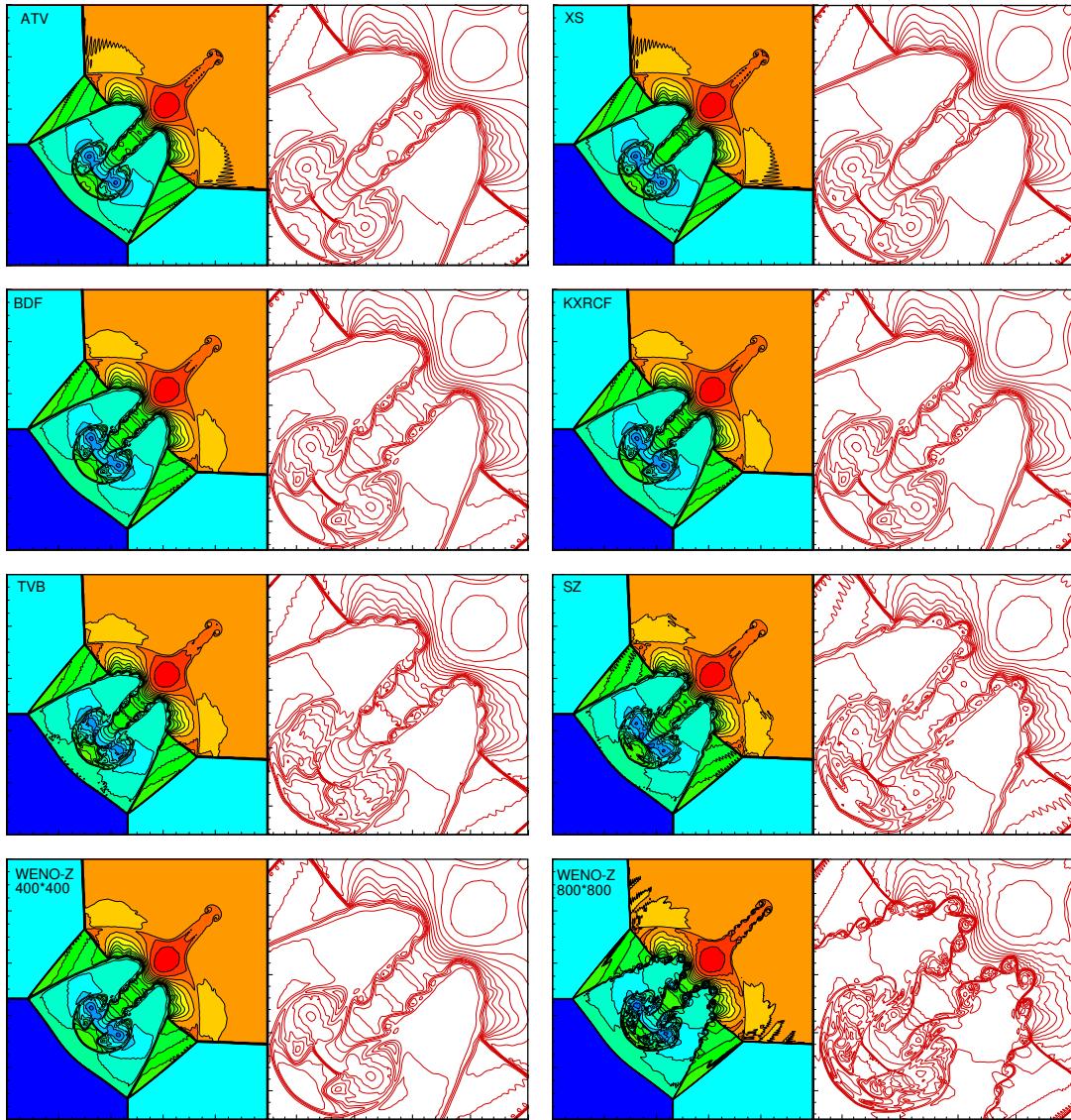


图 3.6: 二维黎曼问题密度等值线, 不同识别方法对比, $t = 0.8$

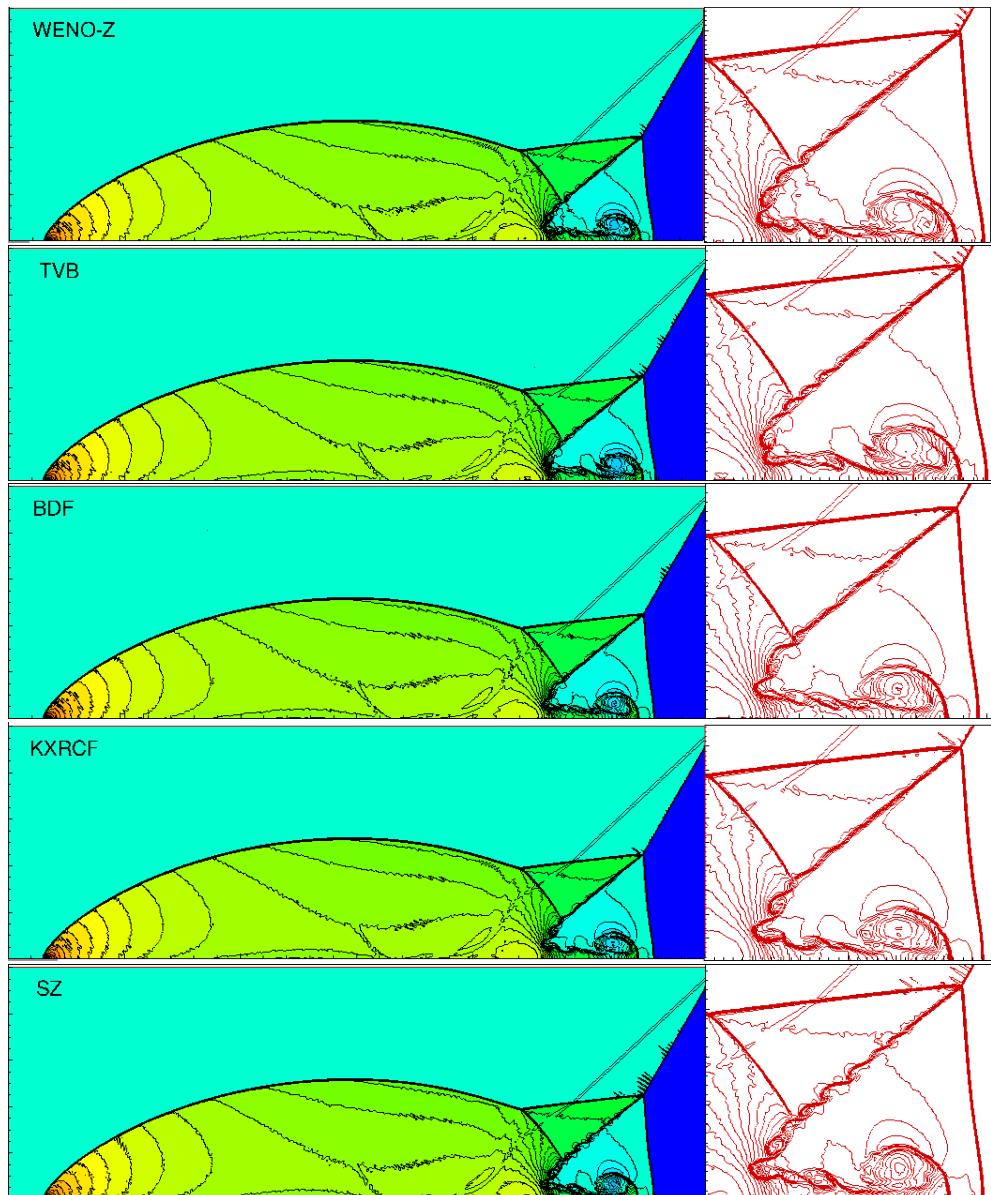


图 3.7: 双马赫反射问题不同识别方法对比, 密度等值线图, $t = 0.2$

第四章 有限紧致格式在理想磁流体中的应用

如前文章节 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、更复杂的特征值系统、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 等人提出的高精度低耗散滤波格式 [312]。Balbas [17] 发展的求解一维和二维 MHD 方程的高分辨率、无振荡中心格式。Gaitonde [97] 将紧致差分格式和滤波器结合，应用在三维理想磁流体方程求解中。考虑到无论是中心格式还是紧致格式在求解激波时都需要做特殊的处理的难点，Shen 等人 [256] 将高精度 WENO 格式推广在 MHD 方程求解中。然而，如第 ?? 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，杂交格式是一个较好的解决思路（前言 1.3.2.1 和第 ?? 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。

另一方面，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另外一项更具有挑战性的工作。关于 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 [38, 68, 239]、HLL 求解器 [147] 和 HLLC 求解器 [114, 136, 205] 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} [195, 197] 将 [193] 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，该类方法会异常复杂。

近些年，对流迎风分离压力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 [182–184, 186, 297]、Van Leer Hänel 格式 [121] 和 Edwards 等人提出的 LDFSS 格式 [84] 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，据此，Zha 等人提出在对流项使用总能的 E-CUSP 格

式 [322, 324, 327–329]，在流体力学方程求解中取得了很好的结果。

Agarwal 等人 [1] 首先将 AUSM 格式应用在一维 MHD 方程求解中，Han 等人随后 [120] 发展了一套求解 MHD 方程的 AUSMPW+/M-AUSMPW+ 格式。2012 年，Shen 等人 [256] 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。

本章，我们将采用了 SZ 识别方法的有限紧致格式 [252, 254] 和为磁流体方程求解发展的 E-CUSP 格式 [256] 相结合，用来求解理想磁流体方程，通过数值算例验证该求解体系的鲁棒性和准确性。

4.1 数值方法

本章空间离散采用有限紧致格式(章节??)，时间离散采用三阶 Runge-Kutta 格式，分裂方法采用 E-CUSP 格式。

4.1.1 E-CUSP 近似李曼求解器 [256]

E-CUSP 格式的构造基于特征分析 [322, 324, 327]，对于控制方程 (1.3)，E-CUSP 格式基本思想是将通量 \mathbf{F} 分裂分对流通量 \mathbf{F}^C 和压力通量 \mathbf{F}^P ，

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^C + \mathbf{F}^P = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 \\ \rho u v \\ \rho u w \\ u E \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ p \\ 0 \\ 0 \\ p u \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

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 $(0, 0, 0, -a, a)$ ，代表延声速向各个方向传播的压力波。根据它们的不同特征，Zha et al. [322, 324, 327] 建议对于对流项采取迎风重构，对于压力项在亚声速区采用同时考虑上游和下游的重构方式。

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。然而由于磁流体方程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。

一维 MHD 方程的空间半离散为

$$\frac{d\mathbf{U}}{dt} = \frac{1}{\Delta x} (\mathbf{F}_{i+1/2} - \mathbf{F}_{i-1/2}) = 0, \quad (4.2)$$

通量 \mathbf{F} 可以分解为

$$\mathbf{F} = \mathbf{f}u + \mathbf{P} + \boldsymbol{\psi}u \quad (4.3)$$

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 pu 从焓项 ρHu 中分裂出来类似， $p_t u$ 也被分裂出来。

根据 [329] 中的 E-CUSP 构造形式，可以给出数值通量为：

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

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 [120] 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 (??) 中的压力项不再是由单个波速决定的，如何计算相对波速 $M_{L,R}$ 仍然是个待解决的问题。Shang [250] 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 [256] 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结果具有更好的稳定性。

4.1.2 控制输运 (Constrained Transport/CT) 方法 [19]

数值模拟 MHD 方程时，需要满足磁场散度为零的限制条件， $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ 。有几种方法可以满足这一条件，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 [231]。投影方法 [35] 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 [19] 提出的控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 [285] 认为控制输运方法是他所有测试过的方法中最准确的。因此本文采用控制输运方法。

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

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

在控制输运方法中，，磁场强度 \mathbf{B} 沿区域边缘取平均值 $\bar{\mathbf{B}}$ ，方程 ?? 的半

离散形式:

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

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 ($n = 6, 7, 8$) 是三维空间的第 n 通量。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{B} 是 B 在计算区域的平均值, 因此需要对能量进行如下修正:

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

4.2 数值算例

4.2.1 二维旋转偏振 Alfvén 波 [285]

该算例是一个存在理论解的光滑算例, Alfvén 波延与 x 轴成 30° 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 ?? 给出 $t = 5$ 时刻, B_{\perp} 的 L_{∞} 误差和 L_1 误差, 可以看到, 采用了有限紧致格式计算结果和 WENO-Z 格式计算结果相比, 误差均小了一个量级左右, 其中 L_1 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。

表 4.1: Alfvén 波算例不同格式精度对比, $T = 5$

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

4.2.2 Orzag-Tang MHD 湍流算例

由于 Orzag-Tang 湍流算例 [?] 具有 MHD 湍流的诸多重要特点, 比如随着涡的发展, 存在很多激波间的相互作用, 该问题已成为验证 MHD 数值方法的一个标准算例 [?, 17, 19, 120]。

该问题初始条件为:

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

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 192×192 的网格, 图 ?? 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 ?? 给出 $x = \pi$ 线上数据对比图, 可以看到新的格式可以更锋利的捕捉波峰和波谷, 代表着新的格式具有更低的耗散。

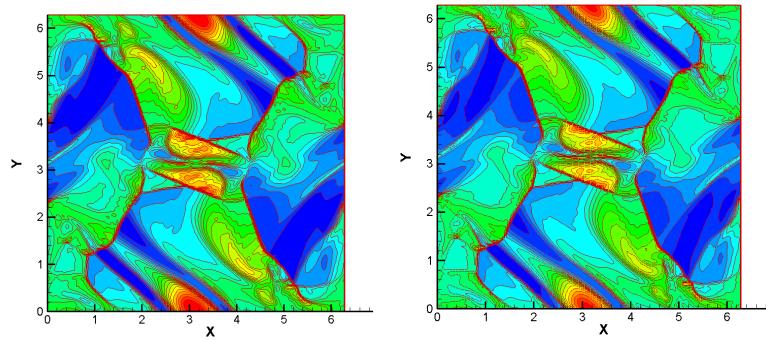
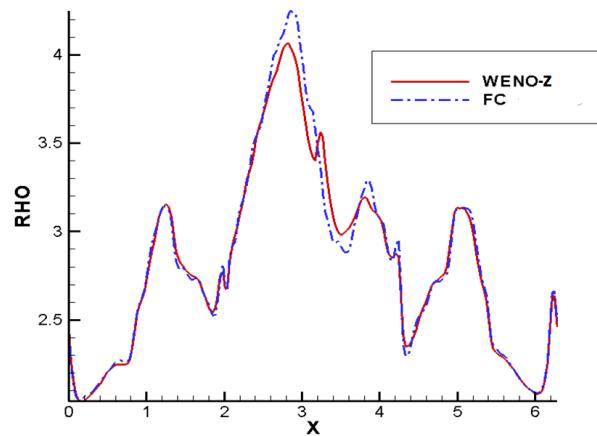


图 4.1: Orzag-Tang 湍流算例不同格式密度等值线对比

图 4.2: Orzag-Tang 湍流算例延 $y = 1$ 线上密度对比

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 $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ 的控制输运方法结合，有限紧致格式可以稳定、高精度的求解理想磁流体问题。通过数值算例，新方法的有效性和鲁棒性得到了验证。

第五章 双信息保存 (DIP) 方法

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

5.1 不同的界面类型和界面方法

界面方法最早可以追溯到 1958 年的洛斯 · 阿拉莫斯国家实验室发展的 Particle-In-Cell(PIC) 方法 [90, 122] 。在第一章 1.4.2 节中，对不同的界面方法都有较详细的介绍。本章中，我们将从方程的角度来分析界面问题。

忽略力学模型，界面的运动可以抽象为求解对流方程

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

其中 \mathbf{V} 为速度场， z 为区分界面两侧物质的物理量，如比热比 γ 、密度 ρ 等。下面将分别对不同类型的界面进行分析。

5.1.1 传统界面

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

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

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

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

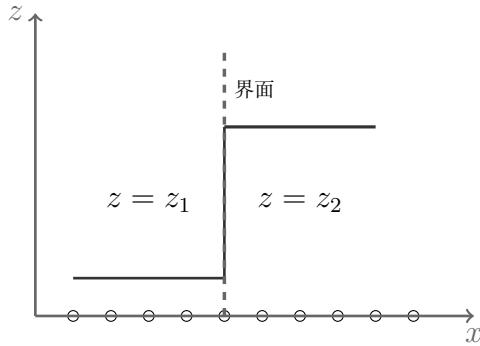


图 5.1: 界面的一维示意图

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

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 [156]。除多相界面外，耗散界面是另外一类较难处理的界面问题，我们在第一章中对耗散界面做过简单介绍。

传统界面类方法求解多相界面和耗散界面困难的根本原因在于这些方法都不是针对某一真实的物理量进行求解，如 γ , ρ ，而只是从拓扑角度计算界面的运动。这一问题导致传统界面类方法无法直接求解如图 ?? 所示的多相界面和具有界面厚度 δ 的耗散界面。

5.2 双信息保存方法基本思想

首先我们考虑两个问题：

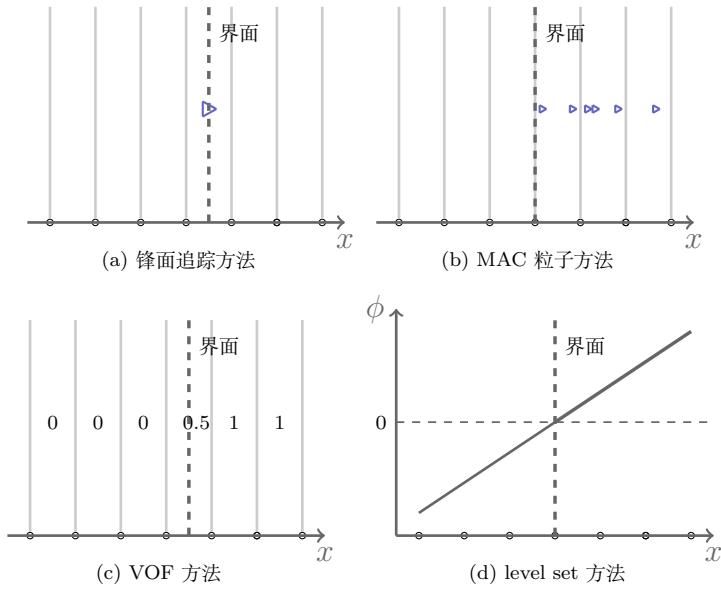


图 5.2: 不同界面方法一维示意图

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

5.2.1 信息点

粒子方法是一种最直观的界面方法, 具有优良的 Lagrangian 特性, 但是由于它明显的不足, 学者们更愿意将它作为一种辅助手段, 如用作示踪粒子, 或者和其它方法结合, 用粒子来修正计算结果, 如 level set-粒子方法, VOF-粒子方法等。粒子方法最大的问题是粒子的离散性和分布的随意性, 难以保证全域的覆盖, 这样就无法像网格方法一样准确的得到任意位置的信息。粒子类界面方法主要包括早期的 Particle-In-Cell (PIC) 方法和目前仍在使用的 Marker-In-Cell (MAC) 方法。PIC 方法采用携带有质量的真实粒子模拟流体的运动, 根据粒子携带的信息可以判断界面位置, 然而, 由于真实粒子无法人为的生成和

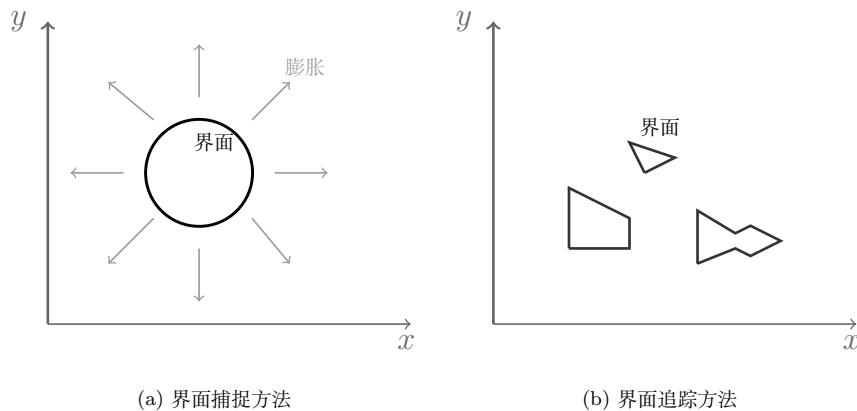


图 5.3: 不同类型界面方法适合求解的工况二维示意图

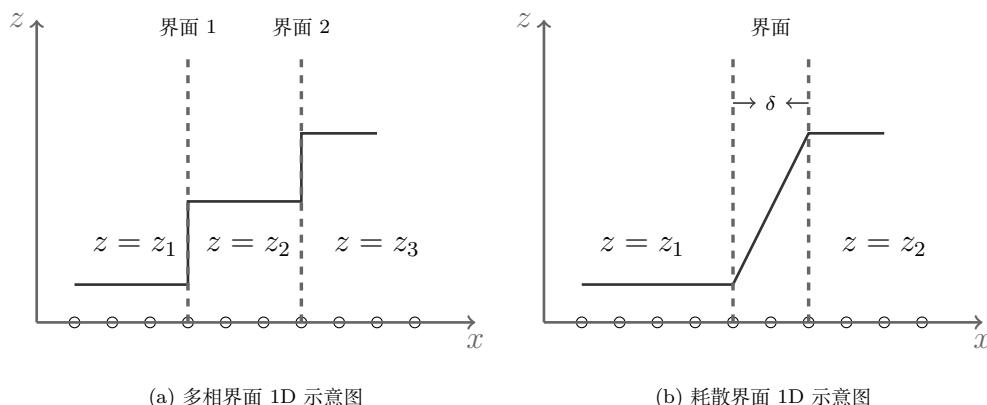


图 5.4: 多相界面和耗散界面一维示意图

抹去，无法保证全计算域每个网格都含有粒子。Marker-and-cell (MAC) 方法采用标记粒子，粒子除位置以外不含有其它信息，是完全的虚拟粒子，增加和减少都不会影响流场的物理性质，但是由于它完全不携带信息，只能通过有粒子和没有粒子判断界面，仍然无法做到覆盖计算域。

我们知道网格是对真实流场的离散，这种离散其实是真实流场信息在网格点上的映射，我们可以随时加密网格、减少网格或移动网格，尽管这可能影响计算精度，但是并不会改变所研究问题本质。如图 ??，类比于网格点，我们可以引入一套和网格点相似的、携带有输运值 z 的粒子，这种粒子可以根据需要增加、减少和移动。我们将这种携带有输运值的 Lagrangian 粒子称为**信息点**。

本文的方法中同时含有两类信息点，因此将该方法称为双信息保存方法，下

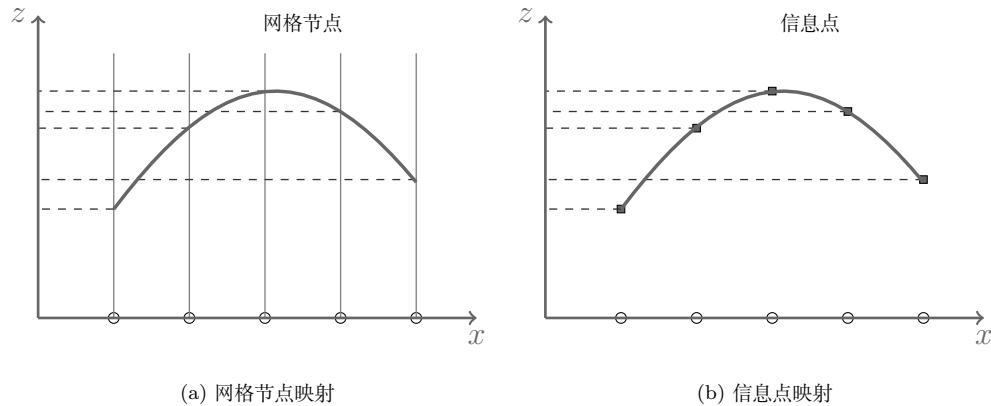


图 5.5: 信息点和网格节点类比一维示意图

文将分别介绍这两类信息点。

5.2.2 单元信息点（单点）

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

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

一. 初始化

如图 ?? 我们首先将 $[i - 1/2, i + 1/2]$ 定义为第 i 单元。开始计算时，在每个单元内引入一个单点。由于单点是和每个单元关联的，所以单

元点无需特殊编号进行区分，单元点的位置可以根据在单元内相对坐标 $X(i)$ 给出，为了简便，下文会在不产生歧义的情况下简写为 X 。单元点的初始条件为：

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

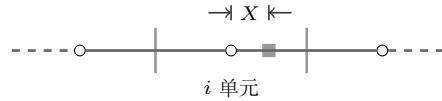


图 5.6: 单元信息点一维示意图

二. 运动追踪

单元点的运动速度是由所在的速度场决定的。通常计算中，例如在流体计算中，可以通过其它方程得到的网格点上的速度。然后通过插值可以近似求得粒子点所在位置的速度。理论上可以构造任意高阶的插值，为了简便，我们只采用两个单元的线性插值，以 i 单元的信息点为例

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

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。

当粒子开始运动后我们需要每一步确定 i 单元点是否运动出单元，如果运动出单元新的位置，我们需要确定单元点新的位置。单元点 i 经过 Δt 时间内运动到临时坐标为

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

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

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

其中 floor 为向上取整函数。

三. 单元点的更新

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

我们首先考虑这样一个问题，对于图 ?? 中所示的情况， i 单元点上 $z = 1$ ， $i + 1$ 单元点上 $z = 0$ ，那么界面究竟是图中哪种情况呢？这在离散问题中其实是无法确定的，需要进行统一的规定。根据所研究的问题是否涉及界面厚度分成无厚度界面和耗散界面两类。

1). 无厚度界面问题中单元点的消去方法

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

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

2). 无厚度界面问题中单元点的生成方法

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

- i. 首先在计算时刻 t_{k+1} 的上一时间步 t_k ，假设我们曾在某一位置引入了一个新的单元点 P ，该点速度为 u' ；
- ii. 经过时间 Δt ，在 $k + 1$ 时间步该单元点正好运动到 i 单元中心 $X = 0$ ；
- iii. 由于我们不知道速度 u' ，我们假设 u' 为 $k + 1$ 时间步 i 单元中心的速度：

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

- iv. 通过逆速度，可以得到临时坐标为

$$L_x = -u' \Delta t / \Delta x \quad (5.7)$$

根据公式 (??) 和 (??) 可以知道 P 在 k 时间步的单元为

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

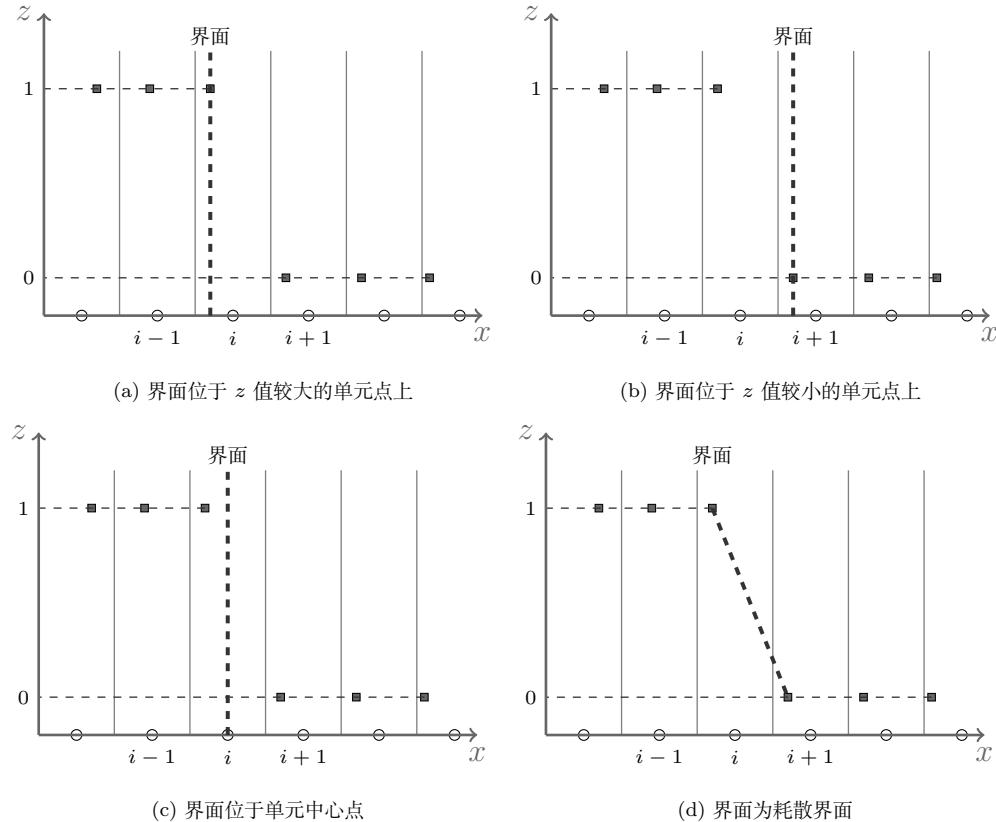


图 5.7: 界面在单元点间可能的分布情况一维示意图

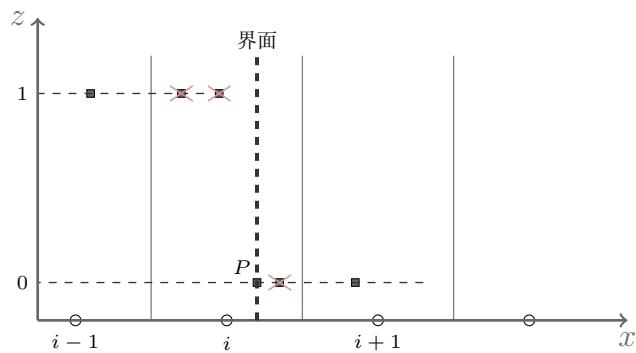


图 5.8: 无厚度界面情况中单元点的消去方法一维示意图

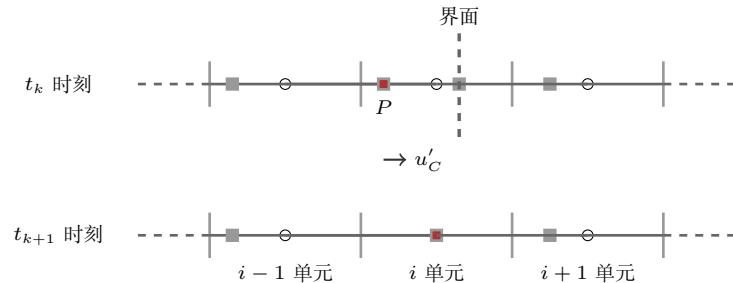


图 5.9: 单元点的回溯生成法一维示意图

由于 k 时间步是已知的，根据求得的位置就可以知道该单元输运值，即

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

3). 耗散界面问题中单元点的消去方法

如果我们研究的是耗散界面，则选择图 ?? 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 ??，如果单元内含有多个单元点，我们采取所有单元点位置和输运值 z 算数平均的形式。

4). 耗散界面问题中单元点的生成方法

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

$$\hat{z}_i = \frac{\omega_1 \bar{z}_{i-1} + \omega_2 \bar{z}_{i+1}}{\omega_1 + \omega_2} \quad (5.8)$$

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

每一时间步，经过单元点运动和更新的计算，我们可以得到每个单元中单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。

5.2.3 粒子信息点（粒子点）

上文中，我们引入了单元信息点，通过单元信息点可以直接求解方程 (??)，无论是传统的无厚度界面、多于两相物质的多相界面还是具有界面厚度的耗散

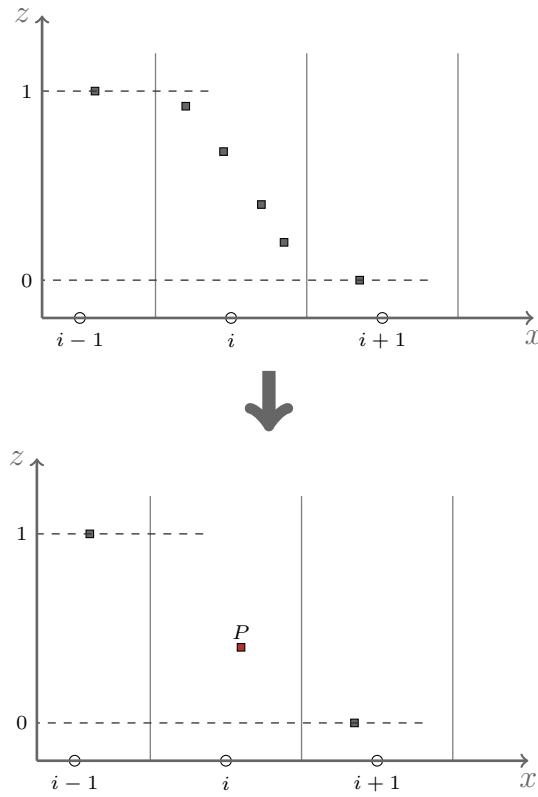


图 5.10: 耗散界面情况中单元素的消去方法一维示意图

界面都可以进行模拟。

单元信息点只具备一半的 Lagrangian 特性，尽管它弥补了粒子点不能全域覆盖、无法计算耗散界面等缺点，但由于每步的更新，新的单元素会不断替代旧的单元素，而新的单元素的生成存在误差，导致对界面结构的保持并不像纯粒子方法那么好。为了改进这一不足，我们引入了另外一套全域追踪的信息点，在每一步对单元素进行修正。将这种全域追踪、具有纯粒子点特性的单元素，称为**粒子信息点**，简称为粒子点。下面我们给出通过粒子点修正单元素的过程。

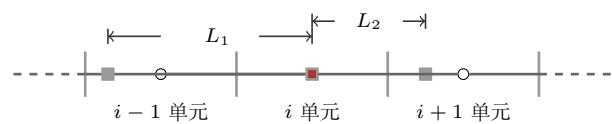


图 5.11: 耗散界面问题中单元素的生成方法一维示意图

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 $X_p(i)$ 。初始化过程和单点相似

$$ip(i) = i, \quad X_p(i) = 0, \quad \bar{z}_p = z(i) \quad (5.9)$$

二. 运动追踪

粒子点的运动和单点相同，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

$$\bar{u}_p = (1 - |X_p|)u(ip) + |X_p|u(ip + s_x) \quad (5.10)$$

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

$$L_x = X_p + u_p \Delta t / \Delta x \quad (5.11)$$

根据临时坐标可以得到新的单元位置和相对坐标：

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

$$X_p = L_x - \text{floor}(L_x + 0.5) \quad (5.13)$$

三. 修正单点

在 t_k 时刻，假设我们已经更新了单点，如果单元 ip 内含有粒子点，我们则采用粒子点重新更新单点，关于新的单点更新策略，无论是对于无厚度界面还是对耗散界面来说，都和通过单点更新完全相同，只是用粒子点取代了原本的单点。

5.2.4 边界处理

粒子方法的边界条件都很容易实现，下面我们分别介绍几种常用的边界条件。如图 ??，首先假设我们计算从第 0 单元到 Nx 单元，DIP 方法由于在计算

中可能需要临近网格的信息，因此在左右分别构造一个虚拟网格 -1 和 $Nx + 1$ 。



图 5.12: 边界和虚拟网格一维示意图

一. 周期边界条件

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

$$\begin{aligned} X(-1) &= X(Nx - 1), \quad X(Nx + 1) = X(1), \\ \bar{z}(-1) &= \bar{z}(Nx - 1), \quad \bar{z}(Nx + 1) = \bar{z}(1) \end{aligned} \quad (5.14)$$

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

$$\begin{aligned} ip(i) &= ip(i) - Nx, \quad \text{if } ip(i) > Nx \\ ip(i) &= ip(i) + Nx, \quad \text{if } ip(i) < 0 \end{aligned} \quad (5.15)$$

而 $X_p(i)$ 保持不变。

二. 入流条件

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

$$X(-1) = 0, \quad \bar{z}(-1) = z_{\text{in}} \quad (5.16)$$

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

$$\begin{cases} N_p = N_p + 1 \\ ip(N_p) = 0 & \text{if } \text{Mrk}_p(0) = 0 \\ X_p(N_p) = 0 \\ \bar{z}_p(N_p) = z_{\text{in}} \end{cases} \quad (5.17)$$

其中 Mrk_p 为单元中粒子点数目标记函数。

三. 出流条件

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

$$X(Nx + 1) = 0, \quad \bar{z}(Nx + 1) = z(Nx) \quad (5.18)$$

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

$$\begin{cases} ip(i) = ip(N_p) \\ X_p(i) = X_p(N_p) & \text{if } ip(i) > Nx \\ \bar{z}_p(i) = \bar{z}_p(N_p) \\ N_p = N_p - 1 \end{cases} \quad (5.19)$$

四. 固壁反射条件

假设图 ?? 中，左边为固壁，对于单点有边界条件

$$X(0) = 0, \quad X(-1) = -X(1), \quad \bar{z}(-1) = \bar{z}(1) \quad (5.20)$$

其中 $\bar{z}(0)$ 不做特殊处理。

对于粒子点，边界无法穿透，因此如果有粒子穿越边界，我们将它做反射

$$\begin{cases} \text{tmp} = ip(i) + X_p \\ ip(i) = -\text{floor}(\text{tmp} + 0.5) & \text{if } \text{tmp} < 0 \\ X_p(i) = -(\text{tmp} + ip(i)) \end{cases} \quad (5.21)$$

5.2.5 DIP 方法一维伪代码

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

一维双信息保存方法（DIP）伪代码

初始化

```

! 单元点初始化
DO i = 0, Nx
  X(i) = 0
  z(i) = z(i)
ENDDO

! 粒子点初始化
Np = Np
DO i = 0, Np
  ip(i) = i
  Xp(i) = 0
  zp(i) = z(i)
ENDDO

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

```

1. 单元点的运动追踪

```

  DO i = -1, Nx + 1
    sx = sign(X(i))
    u(i) = (1 - |X|)u(i) + |X|u(i + sx)
    Lx = X(i) + u(i)Δt/Δx,
    X(i) = Lx - floor(Lx + 0.5)
    M(i) = i + floor(Lx + 0.5)
  END DO

```

2. 单元点的更新

```

  IF Mrk(M) = 0 THEN
    X'(M) = X(i)
    z'(M) = z(i)
  ELSE
    IF z(i) < z'(M) THEN
      X'(M) = X(i)
      z'(M) = z(i)
    ENDIF
  ENDIF
  X'(M) = (X(i) + Mrk(M)X'(M))/(Mrk(M) + 1) ! 多个单元点，进行平均
  z'(M) = (z(i) + Mrk(M)z'(M))/(Mrk(M) + 1)
  Mrk(M) = Mrk(M) + 1
END DO

```

3. 粒子点的运动追踪

```

  DO i = 0, Np

```

```

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

```

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
 $X'(ip) = (X_p(i) + Mrk_p(ip)X'_p(ip))/(Mrk_p(ip) + 1)$  ! 多个粒子点, 取平均
 $\bar{z}'(ip) = (\bar{z}_p(i) + Mrk_p(ip)\bar{z}'_p(ip))/(Mrk_p(ip) + 1)$ 
 $Mrk_p(ip) = Mrk_p(ip) + 1$ 
END DO

```

5. 在空单元生成单元点

```

DO i = 0, Nx
    IF Mrk(i) + Mrkp(i) = 0 THEN
         $L_x = -u(i)\Delta t/\Delta x$ 
         $M = i + floor(L_x + 0.5)$  ! 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

```

5.2.6 二维 DIP 方法

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

的实现过程，详细内容可见附录。

$$\frac{\partial z}{\partial t} + u \frac{\partial z}{\partial x} + v \frac{\partial z}{\partial y} = 0 \quad (5.22)$$

一. 初始化

初始化除了维度增加以外完全和一维相同：

$$X(i, j) = 0, \quad Y(i, j) = 0, \quad \bar{z}(i, j) = z(i, j) \quad (5.23)$$

二. 单元点的运动追踪

首先通过一维线性插值的方式得到单元点速度：

$$\begin{cases} \bar{u}(i, j) = (1 - |X|)u(i, j) + |X|u(i + s_x, j) \\ \bar{v}(i, j) = (1 - |Y|)v(i, j) + |Y|v(i, j + s_y) \end{cases} \quad (5.24)$$

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

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

临时坐标变化：

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

所在单元变化和相对坐标变化为

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

三. 单元点的更新

单元点的更新过程和一维中相同，其中耗散型界面的单元点生成仍采

用临近单元单点加权平均的形式,

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

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:

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

5.3 数值算例

下面我们将通过一维和二维算例验证新方法的表现。

5.3.1 一维数值算例

1. 均匀速度场算例

对于均匀速度场, 粒子点和单点是完全重合的, 信息点间的距离不会变化, 所以也不会出现一个单元存在多个或没有单点的情况。

1). 我们首先测试一个在 $u = 1$ 的均匀速度场中间断函数的传播问题。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 $[0, 1]$, 边界采用周期边界条件。计算采用的网格为 $N = 20$, 计算时间步长为 $\Delta t = 0.005$, 图 ?? 给出 23 个时间步后单点的分布情况。从该算例可以看出, 粒子类方法由于追踪的连续性, 即便在极其稀疏的网格中, 也能对每个信息点上的信息进行准确的追踪。

2). 接下来我们研究更复杂波形的传播, 初始条件为

$$z_0(x) = \begin{cases} \frac{1}{6} (G(x, \beta, z-\delta) + G(x, \beta, z+\delta) + 4G(x, \beta, z)), & -0.8 \leq x \leq -0.6, \\ 1, & -0.4 \leq x \leq -0.2, \\ 1 - |10(x - 0.1)|, & 0 \leq x \leq 0.2, \\ \frac{1}{6} (F(x, \alpha, a-\delta) + F(x, \alpha, a+\delta) + 4F(x, \alpha, a)), & 0.4 \leq x \leq 0.6, \\ 0, & \text{otherwise}, \end{cases} \quad (5.25)$$

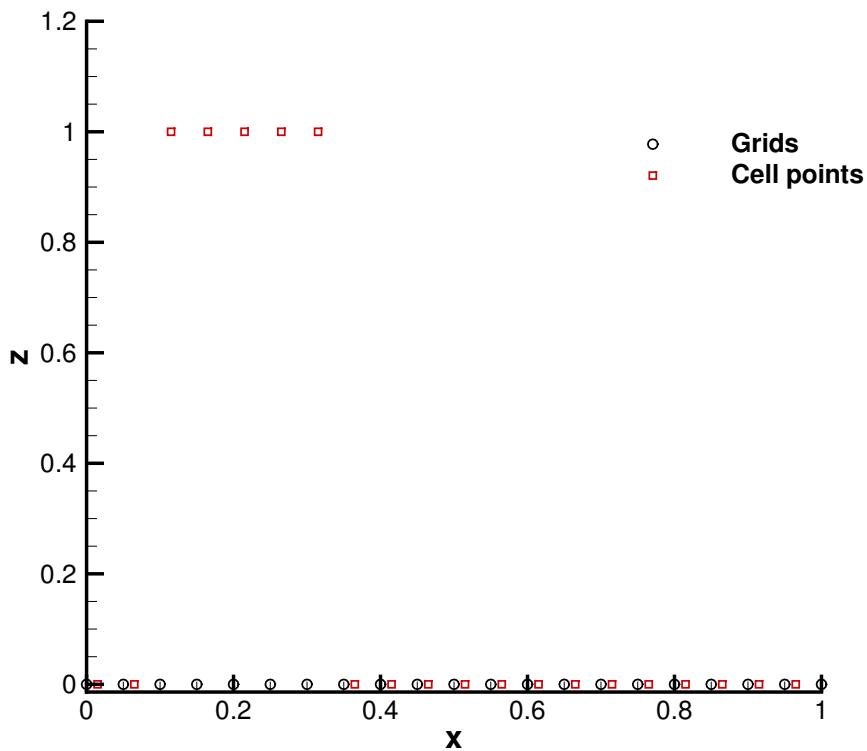


图 5.13: 一维线性对流间断传播算例, 均匀速度场 $u = 1$, 时间步 $Nt = 23$

以及

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

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

其中 $a = 0.5$, $z = -0.7$, $\delta = 0.05$ 和 $\beta = \log 2 / 36\delta^2$ 。计算采用 $N = 200$ 网格, 计算时间为 $T = 6$ 。我们将新方法的计算结果、采用了 WENO 格式的有限差分方法计算结果及参考解进行对比, 从图 ?? 可以看出, 对于该类线性问题, 无论包含强间断的方波还是光滑的波形都能精确地求解。

2. 无粘 Burgers 方程问题

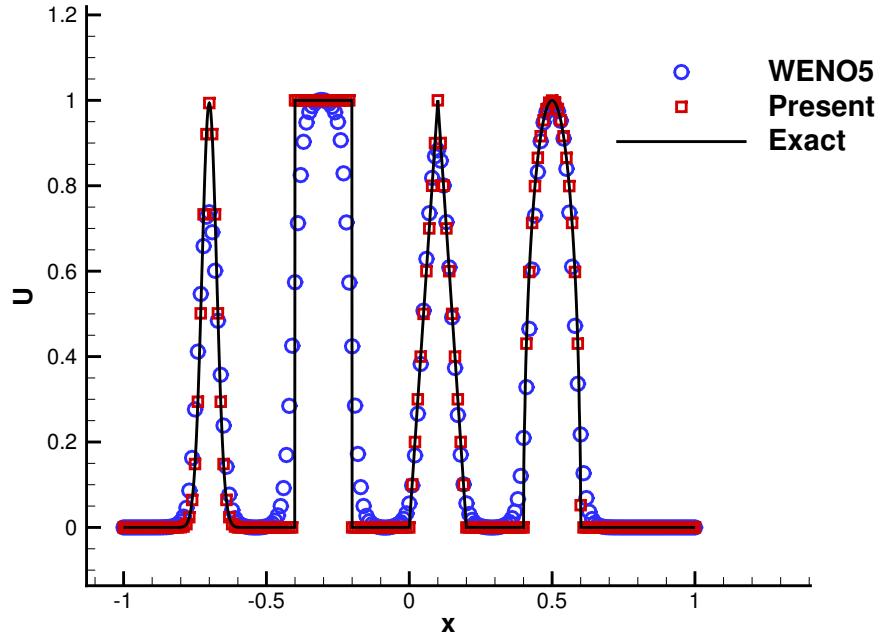


图 5.14: 一维对流方程组合波算例, 均匀速度场 $u = 1$, $T = 6$

无粘 Burgers 方程

$$\frac{\partial z}{\partial t} + z \frac{\partial z}{\partial x} = 0, \quad z_0(x) = \sin(\pi x), \quad 0 \leq x \leq 2. \quad (5.26)$$

速度场为 $u = z$, 因此该方程是非线性方程, 经过一段时间, 原本光滑的波形会形成间断。图 ?? 给出 DIP 方法和 WENO 格式在 $N = 200$ 网格下计算结果对比, 我们可以看到对于这种非线性问题, DIP 方法同样可以模拟, 取得很好的结果。

5.3.2 二维数值算例

二维问题中存在复杂的拓扑变化, 因此更适合用来测试界面方法的表现。

1. 均匀速度场算例

该算例采用 $u = 1$, $V = 1$ 的均匀速度场, 计算区域为 $[0, 1] \times [0, 1]$ 初始时刻一个边长为 0.2 的正方形中心位于 $(0.2, 0.2)$, 正方形内 $z = 1$ 其它区域 $z = 0$, 计算网格为 10×10 , 计算时间为 $t = 0.6$ 。从图 ?? 中给出计算

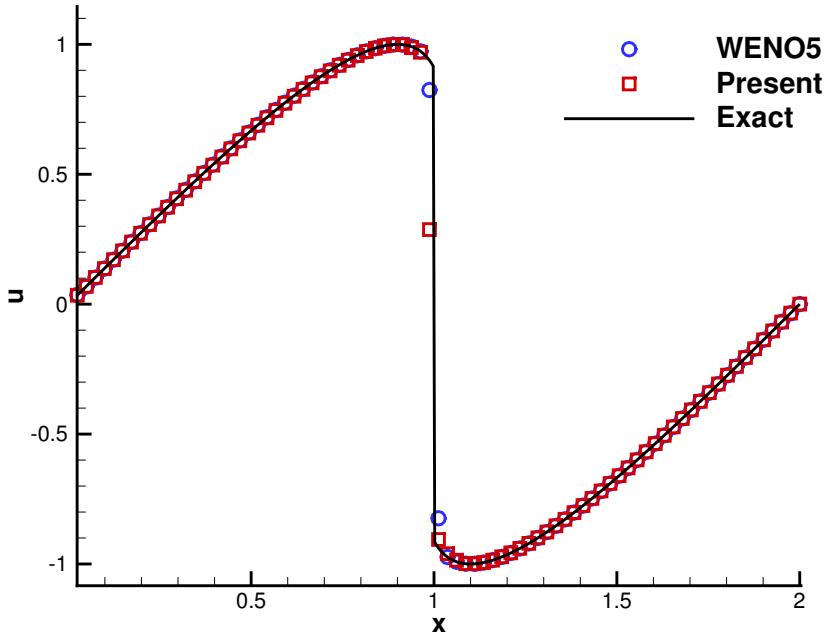


图 5.15: Bugers 方程算例, $T = 0.4$

结果可以看到, 在极其稀疏网格下, DIP 方法仍能准确计算每一个单元点的运动过程。

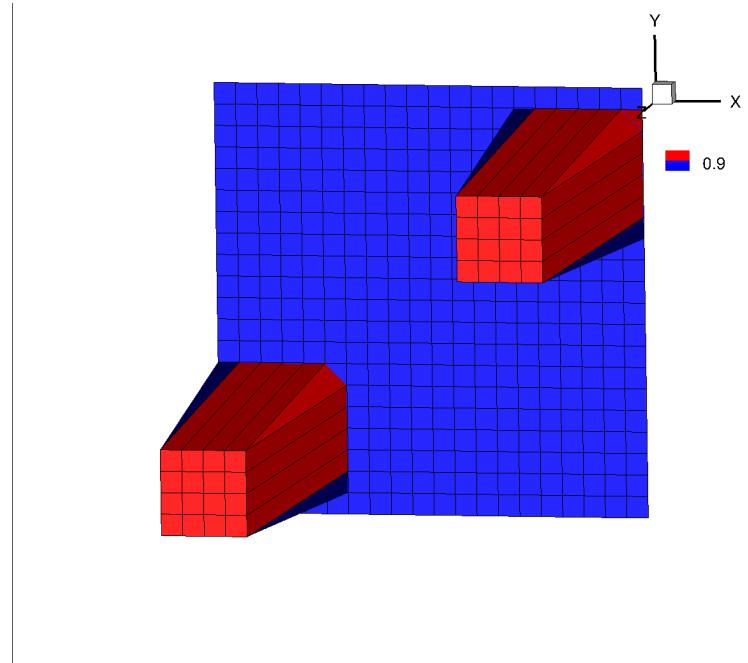
2. Zalesak 圆盘旋转算例

Zalesak 的圆盘旋转算例 [320] 是一个验证界面方法的经典算例, 速度场采用旋转速度场

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

初始条件为

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

图 5.16: 二维均匀速度场间断传播算例, $T = 0.6$

该问题中计算域为 $[0.1] \times [0, 1]$, 采用 $N = 200 \times 200$ 网格。图 ?? 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, DIP 方法可以很好保持圆盘的形状。

3. 界面拉伸算例

我们考虑另外一个常见的界面方法测试算例 [?, 14], 在计算开始, 一个半径为 0.2 的圆圆心位于 $(0.5\pi, 0.7)$:

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

速度场为

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

在该速度场作用下, 界面会被不断拉伸, 一般用来验证界面方法对于拓扑

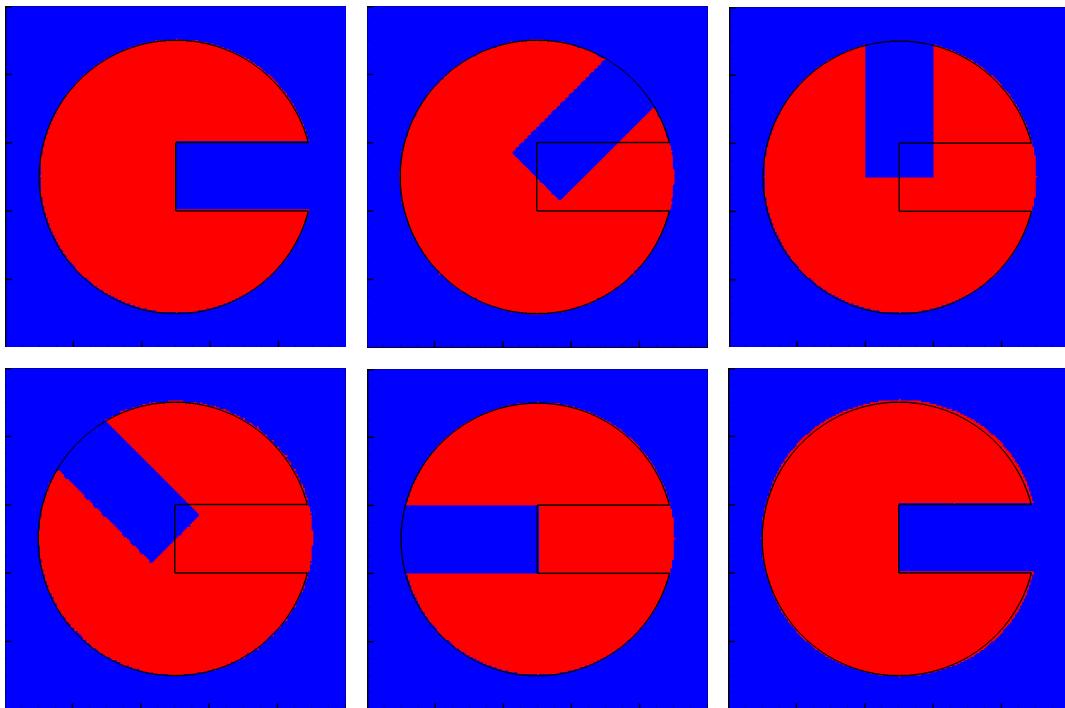


图 5.17: Zalesak 圆盘旋转算例 $N = 200 \times 200$ 网格下计算结果 ($T_1 = 0, T_2 = 0.25, T_3 = 0.5, T_4 = 0.75, T_5 = 1$ and $T_6 = 20$)，其中黑线为初始条件

变化的适应性，往往我们会在一段时间后采取逆速度场，通过圆是否回复开始的位置来判断方法的守恒性。

图 ?? 中给出了 $N = 200 \times 200$ 网格下计算结果，分别为 $T = \pi$ 结果和接下来反向运动 π 的结果， $T = 2\pi$ 的结果和接下来反向运动 2π 的结果，可以看到新方法可以很好的计算界面的拓扑变化，并保持守恒性。

4. 多相界面问题

1). 前文指出，现有的界面方法在求解含有三相和三相以上物质的问题时较为困难，这里我们构造一个和上一个界面拉伸算例相似，但是含有多相分界面的新算例，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 ???.a 所示, 图 ???.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。

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

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

如图???.a 所示, 速度场为

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

图 ???.a 给出初始状态, 经过 $T = 4$, 图 ???.b 中显示, 彩色圆盘由于中心速度快, 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, 一类信息点在单元内运动, 每一步都会重新生成用以保持信息点全域覆盖, 称为

单元点，另一类全域追踪，用来修正单元点由于生成过程而产生的误差，称为粒子点。该方法由于针对于对流方程本身求解，可以很好的处理传统的两相界面、多相界面及耗散界面问题。本章给出了该方法详细的构造过程，并通过一系列算例验证了该方法的有效性和鲁棒性。

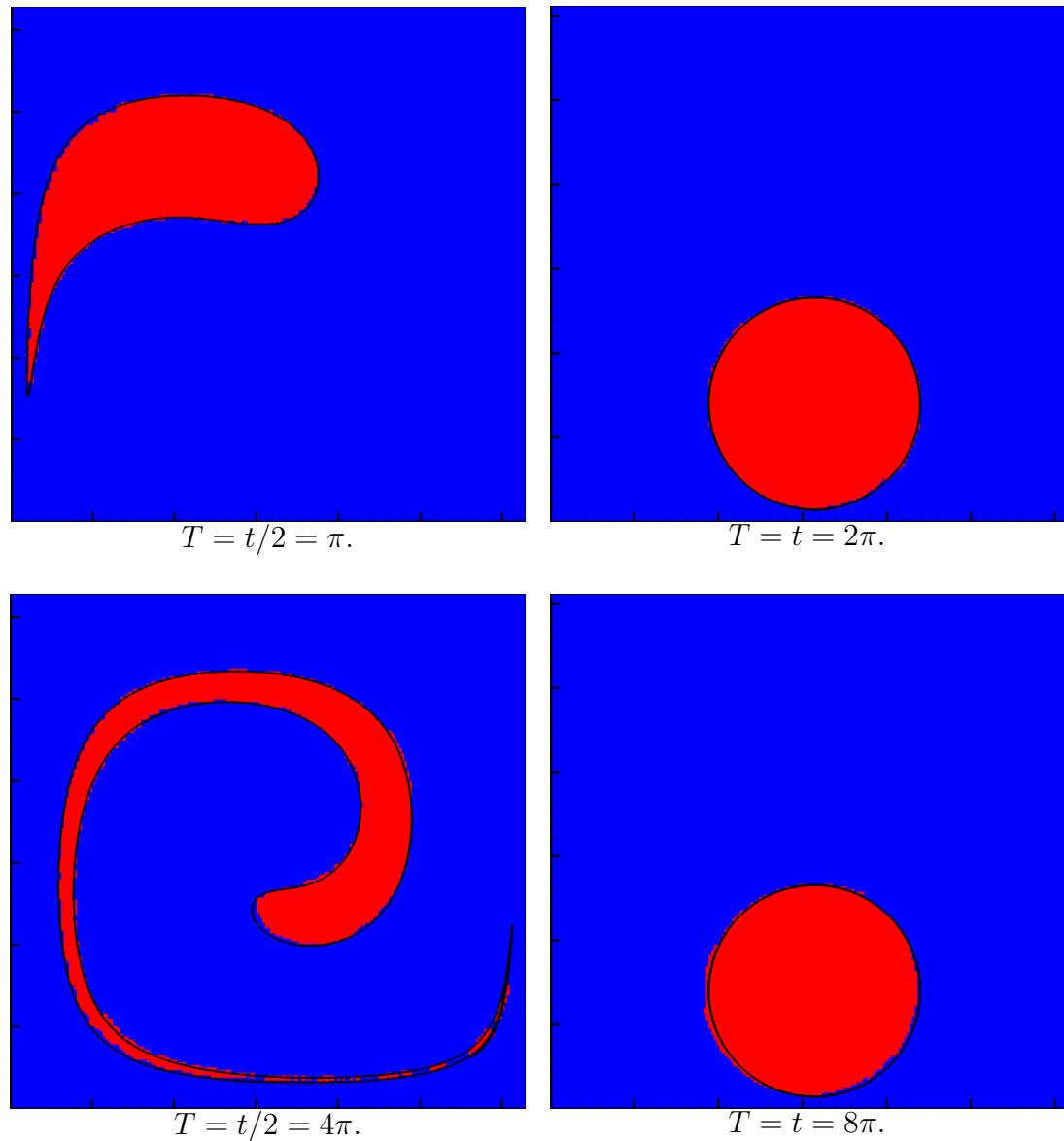
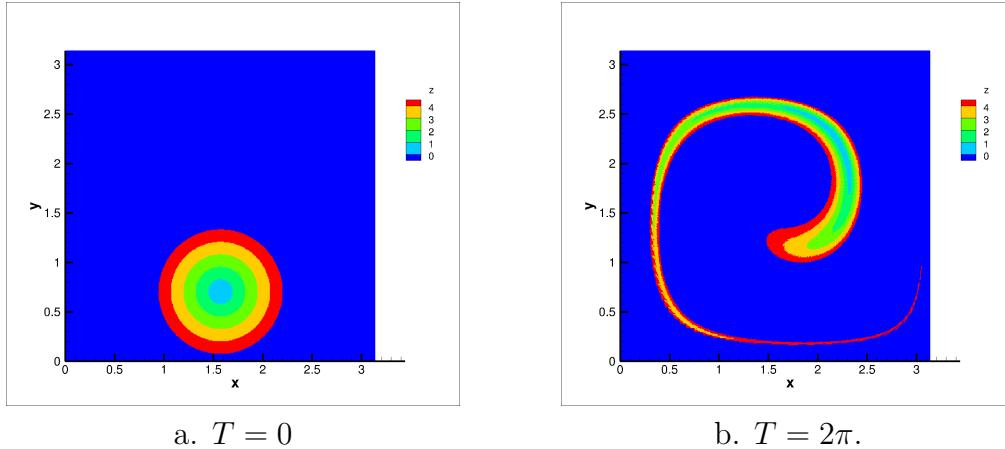
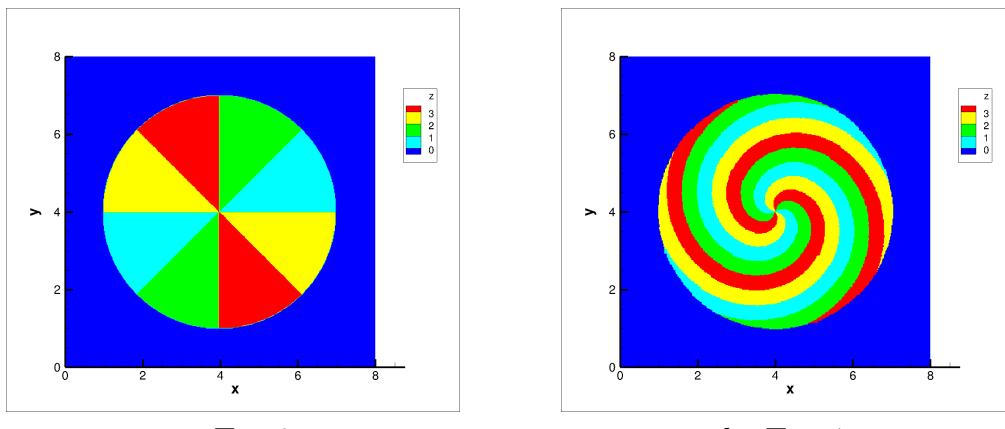


图 5.18: 界面拉伸算例, $N = 200 \times 200$, 其中黑线为参考解

a. $T = 0$ b. $T = 2\pi.$ 图 5.19: 多相界面拉伸算例, $N = 400 \times 400$ a. $T = 0$ b. $T = 4.$ 图 5.20: 多相界面旋转算例, $N = 400 \times 400$

第六章 刚性常微分方程和数值摄动 (NP) 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 [305]。学者们给出了刚性方程多种描述，目前受到最广泛接受的仍然是 1985 年 Curtiss 和 Hirschfelder 最早给出的描述：刚性方程是指那些采用某些特定的隐式格式求解，尤其是采用 BDF 格式，会比采用显示格式求解有优势，通常都有极大的优势，的一类方程 ('stiff equations are equations where certain implicit method, in particularly BDF, perform better, usually tremendously better, than explicit ones')。

刚性和非刚性方程求解起来差别巨大，比如采用显式格式求解刚性 ODE 方程，需要极小的时间步才能稳定，相反的，如果采用隐式格式求解非刚性 ODE 方程，又因为复杂的迭代同样会造成计算效率低下。如何能协调这一对矛盾，一直困扰着 ODE 数值方法的发展。E.Hairer 和 G.wanne 在关于 ODE 方程的经典教材 [117, 305] 中，直接将刚性问题解法和非刚性问题解法分成两册分别讲述，但是由于刚性方程没有明确的定义，很难区分哪些 ODE 方程是刚性的哪些是非刚性的，同时，刚性也是会随时间发展变化的，刚性方程本身刚性的大小也难以界定。例如将在本文第八章中遇到的化学反应 ODE 方程，在该方程中，由于某些组分的时间尺度很小，存在较大的刚性。但是另一方面，由于刚性所在的区域相对计算区域而言很小，同时，考虑到化学反应方程组特征矩阵巨大，隐式求解会存在着复杂的矩阵运算，计算量并不一定降低，也难以采用高精度的隐式格式等问题，多数学者目前仍更愿意采用显式格式在充分小的时间步内进行求解。

如前言中所讨论的，目前除刚性稳定的隐式格式和刚性不稳定的显式格式外，也有一些格式一定程度上能兼顾刚性和非刚性的求解要求，例如，线化梯形公式（LT）[302, 330]，该方法具有二阶精度、显式形式和一定程度的刚性稳定性，因而在如化学反应这种即存在刚性和非刚性又由于特征矩阵巨大而难以采用隐式格式求解的方程中得到较多的应用。然而，线化梯形公式也仅仅具有二阶精度，在非刚性的区域精度不足，另外，该方法也非绝对的刚性稳定的，刚性过大仍然会出现计算问题。

由上面分析可以看出，如果能找到或者构造一种高精度的、刚性稳定且具有显形式的格式对于处理例如化学反应等可能存在刚性 ODE 方程的问题，尤为重要的。在本章中，我们基于 Gao 数值摄动的思想 [98, 252, 334]，构造了针对 ODE 方程（??）的刚性稳定、高精度且具有显形式的数值摄动格式。并通过理论分析和数值计算验证了该类方法的效果。

6.2 数值摄动（NP）方法

数值摄动方法是 Gao 提出和发展的一种通过对低阶格式中的系数进行小参数摄动来构造高阶微分方程数值格式的方法，目前主要用来求解对流-耗散型方程如 NS 方程，包括摄动有限差分方法 [349, 355] 和摄动有限体积方法 [356]。

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

下面我们基于相同的思想构造求解方程（??）的数值摄动（NP）方法。

对于该方程，一阶显示欧拉格式为

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

我们将它作为构造数值摄动方法的基本格式，对其泰勒展开，可以得到

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

和对流方程构造数值摄动方法 [98, 334] 相同，我们在方程（??）左侧引入一个摄

动多项式 p , 格式变为

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

其中的幂次多项式 p 为

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

将公式 (??) 带入公式 (??) 并且对其泰勒展开有

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

从中可以看出, 如果我们令方程右端第二项为零, 即

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

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

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

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 :

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

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

$$\cdots$$

如果 f 仅是 x 的函数, 则 a_i 可以简化为

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

为了简便，方程 (??) 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

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

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

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

其中 \bar{p}_3 应该是 p_3 的二阶近似，有

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

新的三阶变形 NP 格式同样具有三阶精度，且较原有的三阶 NP 格式稳定区域更大，关于稳定性我们会在下一章分析。

6.3 NP 格式的稳定性分析

在前面刚性方程介绍中，曾提到，对于刚性方程的算法，稳定性是最重要的，因此我们验证一种方法是否适合求解刚性问题，首先要分析它的刚性稳定性 [249]。

对于格式刚性稳定性的分析，首先是格式的线性稳定性，线性稳定性一般通过 A 稳定性及强 A 稳定性来判定，关于线性稳定性，我们首先需要给出线性方程：

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

采用某一方法对方程 (??) 进行离散后可以写成统一的形式

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

其中 $h = q\Delta t$ 。

在 (?) 的基础上，我们可以给出 A 稳定性和强 A 稳定性两条定义

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

DEFINITION 2 (Strong A-stable). 如果一个格式是 A-stable 的同时又满足

$$\lim_{Re(h) \rightarrow -\infty} |E(h)| = 0$$

， 则认为该格式是强 A 稳定的。

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

(1) 一阶显式欧拉格式

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

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

(2) 一阶隐式欧拉格式

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

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

(3) 二阶线化梯形公式 [302, 330]

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

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

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

(4) 三阶显式 Runge-Kutta 格式

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

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

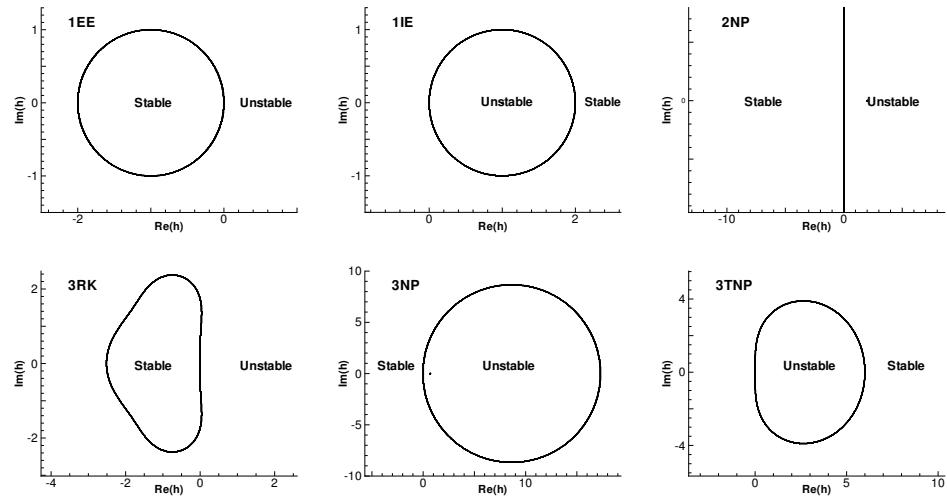
对于方程 (??), 很容易求得摄动系数为 $a_1 = -\frac{1}{2}q$, $a_2 = \frac{1}{12}q^2$, \dots . 因此 NP 格式的 $E(h)$ 函数分别为

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

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

6.4 不同格式的数值比较

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

图 6.1: 不同格式在 h 复平面上稳定区域

算例 1). 首先我们研究如下一个非线性方程 [117]

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

针对该方程, 摄动系数为

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

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

算例 2). 方程

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

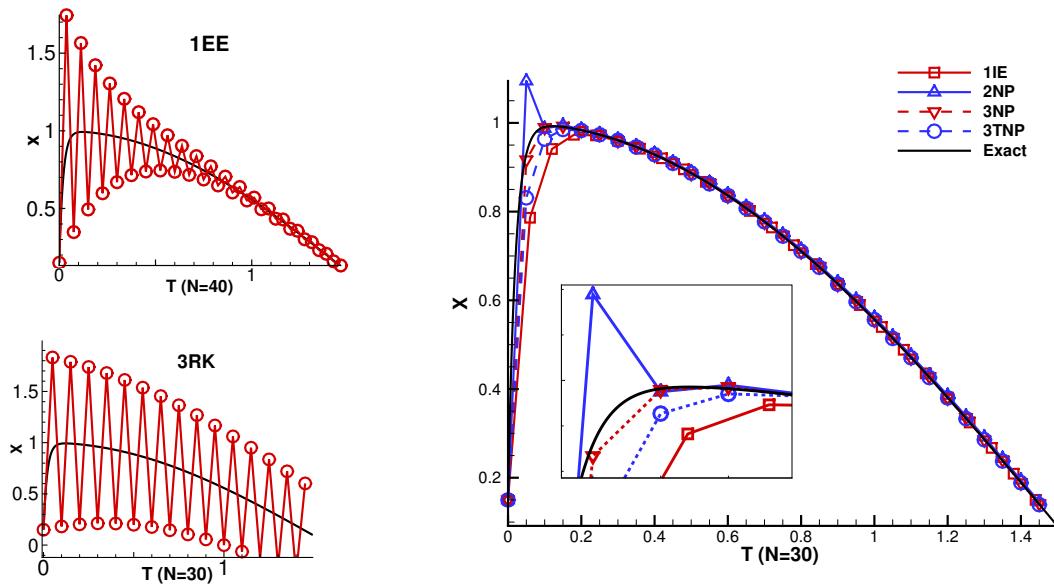


图 6.2: 不同格式求解 ODE 方程 (??) 结果. 参考解为采用 $N = 3000$ 网格得到

作为第二个算例，该算例存在精确解

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

同样不难求的摄动系数分别为

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

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

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、刚性稳定且具有显式形式的数值摄动 (NP) 格式，经过理论分析和数值计算，验证了该类格式，尤其是三阶 TNP 格式高精度及刚性稳定等性质。再下一章中，我

表 6.1: 不同 ODE 格式精度分析

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

们将会把三阶 TNP 格式应用在化学反应方程求解中，用来解决化学反应 ODE 方程中的时间刚性问题。

第七章 DIP 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，还可能存在空间刚性问题。空间刚性问题并没有严格的规定，通常是指在网格不足时，爆轰波波速或爆轰波结构可能会出现非物理理解现象 [59]。

7.1 空间刚性问题形成过程的分析

空间刚性问题的研究主要针对的是有化学反应源项的 Euler 方程系统，即方程组 (A.3)。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 (??) 中，也可能存在空间问题。下面我们就该方程定性的分析非物理理解产生的过程和原因。

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

对于方程 (??)，为了便于分析问题和进行求解，通常采用算子分裂的方法，将该方程分裂成对流步和反应 ODE 步两部分，即

$$\text{对流步 (A)} : \frac{\partial z}{\partial t} + \frac{\partial z}{\partial x} = 0 \quad (7.2)$$

$$\text{反应步 (R)} : \frac{dz}{dt} = -\mu z(z - 0.5)(z - 1) \quad (7.3)$$

然后采用一阶分裂算法

$$Z^{n+1} = R(\Delta t)A(\Delta t) \quad (7.4)$$

或者二阶 Strang 分裂 [272] 算法

$$Z^{n+1} = A\left(\frac{\Delta t}{2}\right)R(\Delta t)A\left(\frac{\Delta t}{2}\right) \quad (7.5)$$

进行计算。

方程 (??) 中的 μ 是可调参数，通过上一章可以知道，如果 μ 很大时候，ODE 方程 (??) 会存在刚性，需要采用稳定的 ODE 求解方法，如 NP 格式，进行求解。为了便于说明问题，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 ?? .a 的波形会变成图 ?? .b 中所示的情况；如果 μ 较小时，点 i 和 $i+1$ 的源项在单位时间内产生的影响同样很小，最后结果可能变成如图 ?? .c 中的结果；但是如果 μ 很大时，相应的错误的源项值同样会很大，ODE 过程产生的影响可能会如图 ?? .d 所示，随着时间累计这种错误的源项激活过程会导致非物理理解的出现，也就是前文中所说的空间刚性问题。

根据以上定性的分析，我们可以得出这样的结论：对于线性方程 (??) 而言，空间刚性问题是由于对流过程中的数值耗散导致的源项错误激发造成的。在化学反应流动方程中这种非物理理解的产生过程会更为复杂，但是根本原因是相同的，关于这一点，接下来我们将在反应欧拉方程的分析中得到验证。

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

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = \mathbf{S} \quad (7.6)$$

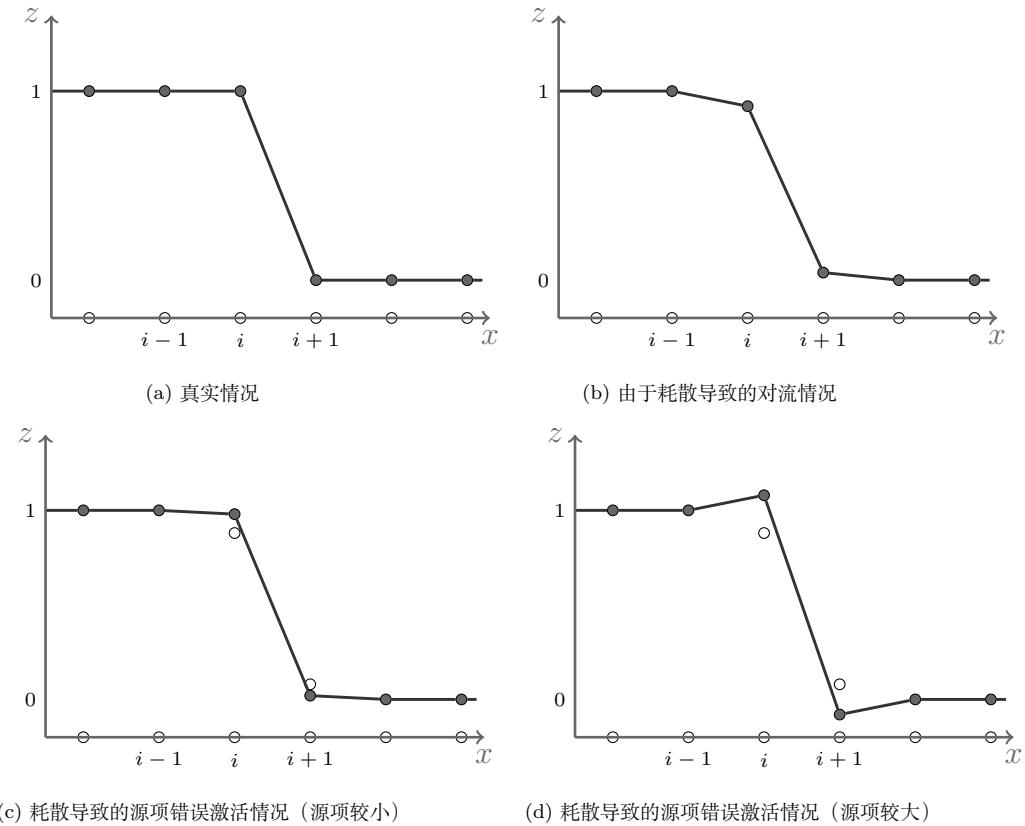


图 7.1: 含源项线性对流方程空间刚性问题示意图

其中

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

根据有无源项，我们可以将方程 (2.16) 写成如下形式

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{U}_1}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_1}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial \mathbf{U}_2}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_2}{\partial x} = \mathbf{S}_1 \end{cases} \quad (7.7)$$

其中

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

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

方程 (??) 中第二项可以展开为

$$\mathbf{Z} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{Z} \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \rho \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial t} + \rho u \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial x} = \mathbf{S}_1 \quad (7.8)$$

其中 $\mathbf{Z} = (z_1, z_2, \dots, z_{ns-1})^T$ 。将其中的质量守恒项消去可以得到

$$\frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial t} + u \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial x} = \mathbf{S}_e \quad (7.9)$$

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 (??) 和含源项的线性对流方程 (??) 具有完全相同的形式，由此也可以证实，线性对流方程中的非物理理解同样会存在于反应欧拉方程中，由此带来化学反应方程中的空间刚性问题。

与方程 (??) 相同，方程 (??) 同样可以算子分裂成对流项和反应项两部分，

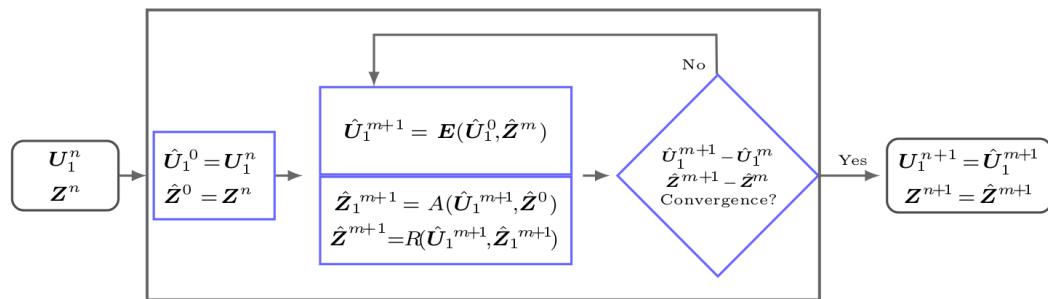


图 7.2: 分裂方法迭代过程流程图

这样就可以把方程 (??) 分裂为如下具有不同特点的三部分

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{U}_1}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_1}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial t} + u \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial x} = 0 \end{cases} \quad (7.10)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial t} + u \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial x} = 0 \\ \frac{d\mathbf{Z}}{dt} = \mathbf{S}_e \end{cases} \quad (7.11)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{U}_1}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_1}{\partial x} = 0 \\ \frac{d\mathbf{U}_1}{dt} = \mathbf{R}(\mathbf{U}_1, \mathbf{Z}) \end{cases} \quad (7.12)$$

这里我们并不采用一阶分裂方法或二阶 Strang 分裂方法，而是通过一种迭代的方式来减少分裂误差，具体的计算过程如流程图 ?? 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 分别代表求解方程 (??) 欧拉方程部分 (??)、组分对流部分 (??) 和反应 ODE 部分 (??) 的算子。

7.3 DIP 方法在反应 Euler 方程求解中的应用

想要解决刚性问题，有两种方式，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 [330]，Bao 和 Jin 提出的随机投影方法 [20–22]，及 Wang 等提出的反应步子网格重构方法 [302] 等，但是由于源项刚性并非一定存在，因此这些方法都需要一些预先的假设，如刚性前提假设等。另外一种消除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 [54] 和 Yee 等人提出的非线性限制器方法等 [313]，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 [311]。

通过方程的分析我们看到，消除方程 (2.16) 中的所有耗散是没有必要的，

方程 (??) 中是否有耗散对源项并没有直接影响，只要限制方程 (??) 中的耗散就能避免非物理理解的产生，这点和含源项的线性对流方程 (??) 是相同的。

方程 (??) 恰好是界面运动的控制方程，因此，采用界面方法捕捉或者追踪化学反应界面是一个很直接的想法，难点在于化学反应界面是有厚度的耗散界面，因此很多传统的界面方法都难以应用在该类问题上。第 ?? 章，我们构造的 DIP 界面方法正是针对于求解方程 (??) 提出的，具有处理耗散界面的能力，这里我们就将 DIP 方法应用在反应 Euler 方程求解中。

DIP 方法应用在反应 Euler 方程求解中有三点需要注意：1，源项并不是作用在单元函数值上，而是作用在单元内的单点和粒子点上；2，由于 (??) 是一个方程组，因此输运值也不再是 z 而是向量 Z ，而 Z 中每个元素都遵循相同的速度场，因此这里并不需要增加信息点数量。3，反应界面是耗散界面，因此我们应该采用针对于耗散界面的处理方法。这里以粒子点为例，给出需要修正的伪代码 (参照章节 ??)，其中 $Z = (z_1, z_2, \dots, z_{ns-1})^T$ ，其它如 \bar{Z} 、 \bar{Z}_p 是类似的。

...

3. 粒子点的运动追踪

```
DO i = 0, Np
```

...

4. 粒子点修正单点

```
X'(ip) = (X_p(i) + Mrk_p(ip)X'_p(ip))/(Mrk_p(ip) + 1)
```

```
DO j = 1, Ns - 1
```

```
    z'_j(ip) = (z_pj(i) + Mrk_p(ip)z'_j(ip))/(Mrk_p(ip) + 1)
```

```
ENDDO
```

```
    Mrk_p(ip) = Mrk_p(ip) + 1
```

```
END DO
```

5. 在空单元生成单点

...

6. 在粒子点上作用源项

```
DO i = 0, Np
```

```
    DO j = 1, Ns - 1
```

```
        z_p(i) = R(z_p(i))
```

```
ENDDO
```

```
ENDDO
```

```
...
```

7.4 NP 方法在反应源项 ODE 求解中的应用

由于 ODE 方程 (??) 可能是刚性的，因此这里我们采用上一章提出的刚性稳定的三阶变形数值摄动 (3TNP) 格式 (??)。考虑到方程 (??) 中源项形式并不唯一，对应的摄动系数也并不相同，在前言章节1.1.4中，我们给出了本文会应用到的所有反应模型形式，这里给出本章会用到的不同反应模型源项对应的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

$$S_e = -K(T)z \quad (7.13)$$

对应的 3TNP 格式为

$$z_{n+1} = z_n + \Delta t f(t, z_n) / \bar{p}_3 \quad (7.14)$$

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 都为向量, 源项形式为

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

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

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

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

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 Δz 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

本章的计算中，我们采用新的分离方法将方程分裂成三部分，在 Euler 部分（??）我们采用 LF 分裂方法（??）、五阶 WENO 空间离散格式（章节 ??）和三阶 Runge-Kutta 时间离散格式（??）；在组分对流步（??）采用 DIP 方法；在反应步采用 3TNP 格式。作为对照，我们采用 [20, 302, 330] 等引文中常用的分裂方法，将方程 (2.16) 算子分裂成如下两部分

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = 0, \quad (7.15)$$

$$\frac{d\mathbf{U}}{dt} = \mathbf{S}, \quad (7.16)$$

在对流部分同样采用 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

前文中，我们曾采用含源项的线性对流方程（??）分析了空间刚性产生的原因，这里我们通过数值方法验证新的方法是否可以如设想的一样解决这一问题。

下面分别计算 $\mu = 10$ 和 $\mu = 10000$ 两个算例，计算时间为 $T = 0.3$ ，计算网格为 $N = 200$ ，对于初始条件

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

有精确解

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

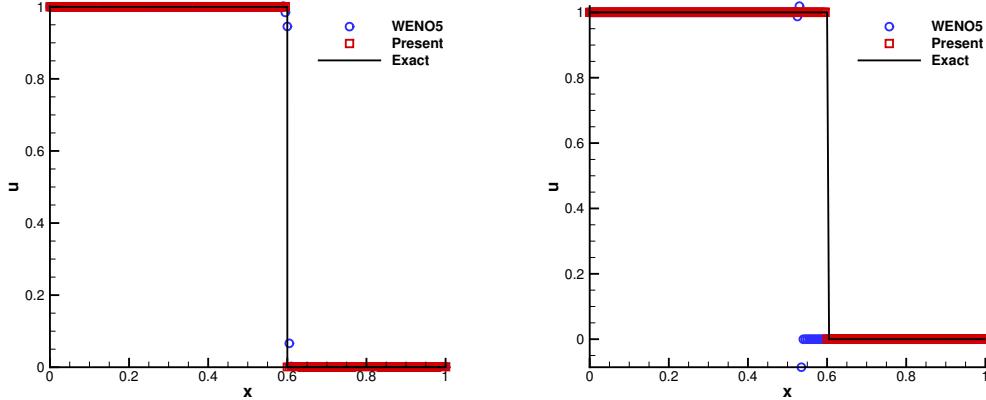


图 7.3: 含源项线性对流方程算例, $t = 0.3$ 。左图: $\mu = 10$ 无刚性情况; 右图: $\mu = 10000$ 刚性情况

图 ?? 中左图为 μ 值很小情况的计算结果, 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, 这种激发很微弱, 且不会累计, 这种情况我们可以称其为非刚性情况。右图中给出了 μ 值很大情况下的计算结果, 可以看到, 采用传统格式会导致错误的计算结果, 表明在 μ 值较大时, 源项的错误激发较严重, 且随着时间会累计, 可以将这种情况称为刚性情况。而采用新的方法, 由于不存在耗散点的出现, 因此不会存在源项的错误激发, 无论对于刚性情况, 还是非刚性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 [?, 20, 59, 302], 该算例中采用 Arrhenius 源项 (1.10), 所用到的常参数为

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

初始条件包含左侧的已燃气体和右侧的未然气体:

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

其中 $\rho_0 = 1.201 \times 10^{-3}$, $p_0 = 8.321 \times 10^5$ 以及 $u_0 = 0$ 。初始易燃气体状态, 可以通过 C-J 关系计算得到 [53, 58, 59, 63]

$$\begin{aligned} p_b &= -b + (b^2 - c)^{1/2}, \\ \rho_b &= \rho_u [p_b(\gamma + 1) - p_u]/(\gamma p_b), \\ S_{cj} &= [\rho_0 u_0 + (\gamma p_b \rho_b)^{1/2}]/\rho_0, \\ u_b &= S_{cj} - (\gamma p_b / \rho_b)^{1/2}, \\ b &= -p_u - \rho_u q_0(\gamma - 1), \\ c &= p_u^2 + 2(\gamma - 1)p_u \rho_u q_0/(\gamma + 1), \end{aligned} \quad (7.17)$$

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 $\Delta x = 5 \times 10^{-6}$ (既 $N = 10000$) 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 [?, 20, 59]。

图 ?? 和图 ?? 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, 而传统方法不可以避免的存在虚假的物理解。

Kotov 等人 [162] 指出虚假解是否存在受到 CFL 数的严重影响, 另外, 增加刚性系数同样会影响到非物理的产生。为了验证新方法在这两个问题中表现, 我们将 K_0 增加到 $100K_0$, 采用 $N = 300$ 网格。从图 ?? 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。

在该算例中, 我们还测试图 ?? 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 ?? 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。

Example 7.2.

该算例是另外一个 C-J 爆轰算例 [131, 284, 302], 采用 Heaviside 源项模型

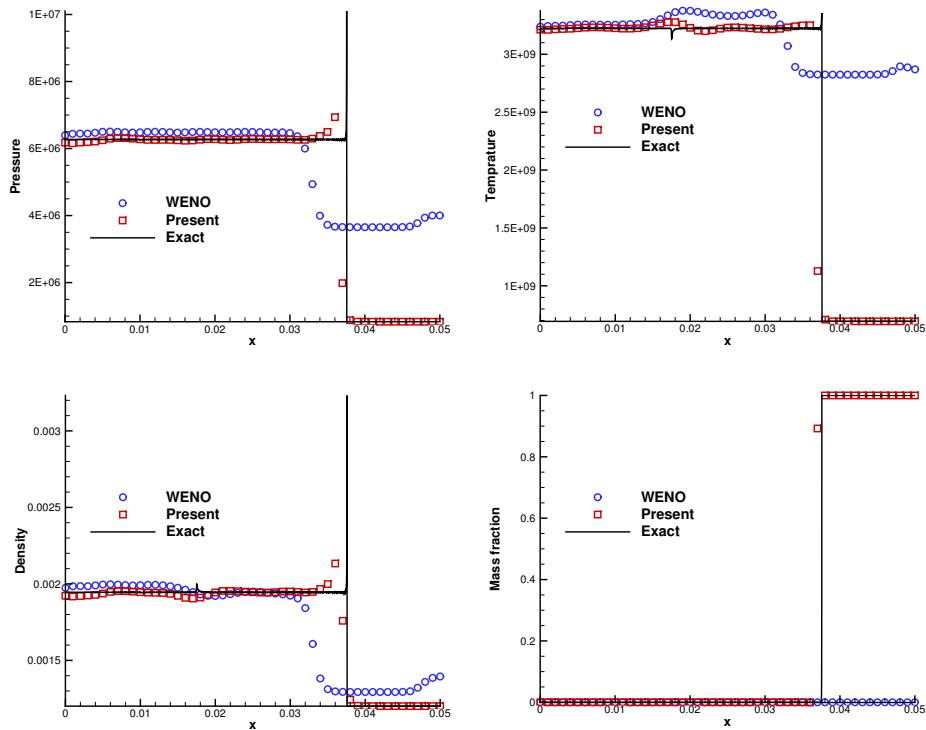


图 7.4: 算例 ?? 的计算结果, $T = 3 \times 10^{-7}$, $N = 50$

(1.11)。该算例中用到的参数为

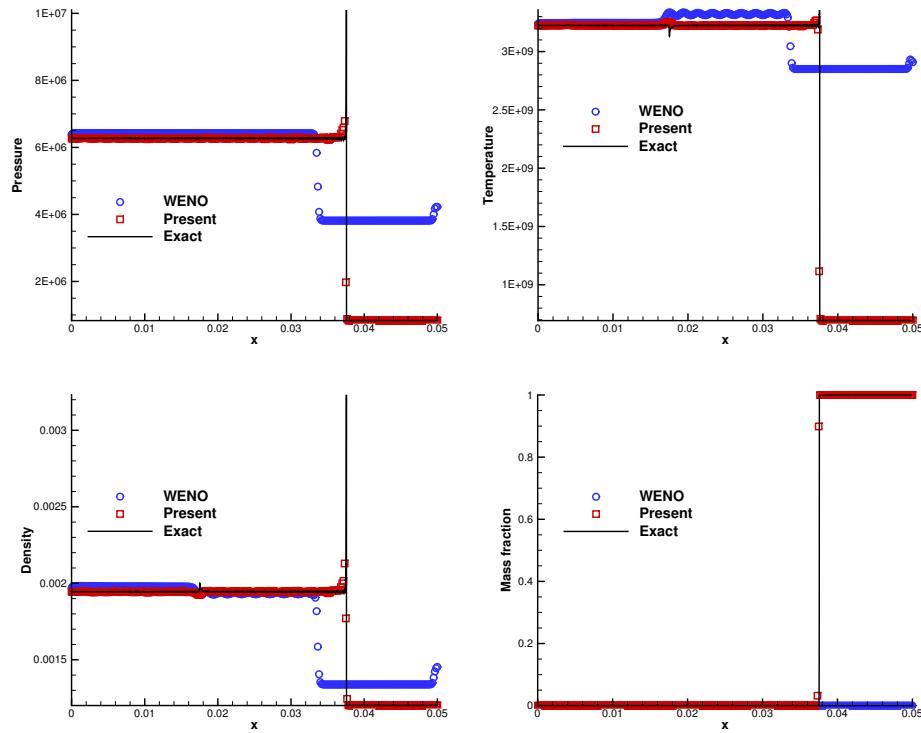
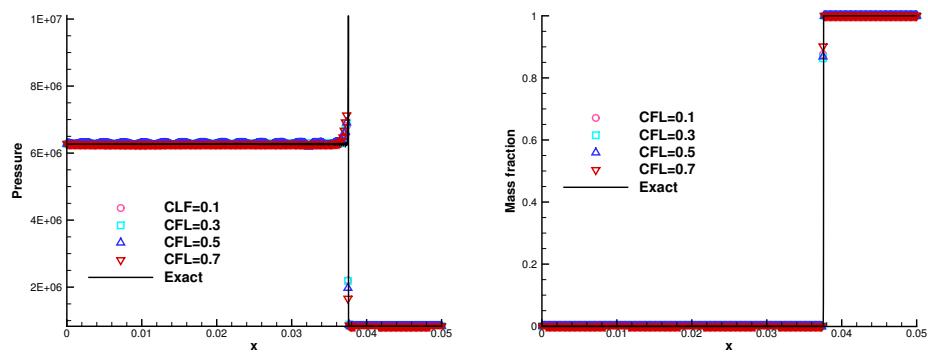
$$(\gamma, q_0, K_0, T_{\text{ign}}) = (1.4, 25, 16418, 25)$$

初始条件为

$$(\rho, u, p, z) = \begin{cases} (\rho_b, u_b, p_b, 0), & x \leq 10 \\ (1, 0, 1, 1), & x > 10 \end{cases}$$

已燃状态同样可以通过方程 (??) 求得。

图 ?? 和图 ?? 给出 $N = 50$ 和 $N = 300$ 网格下的计算结果。参考解 “exact” 是通过传统方法在 $N = 10,000$ 网格下计算得到。可以看到, 相比如传统方法在加密的网格下仍然存在非物理解, 新方法即便在非常稀疏网格下也能准确的捕捉爆轰波的传播。

图 7.5: 算例 ?? 的计算结果, $T = 3 \times 10^{-7}$, $N = 300$ 图 7.6: 算例 ?? 采用 $100/\epsilon$ 的计算结果, $T = 3 \times 10^{-7}$, $N = 300$

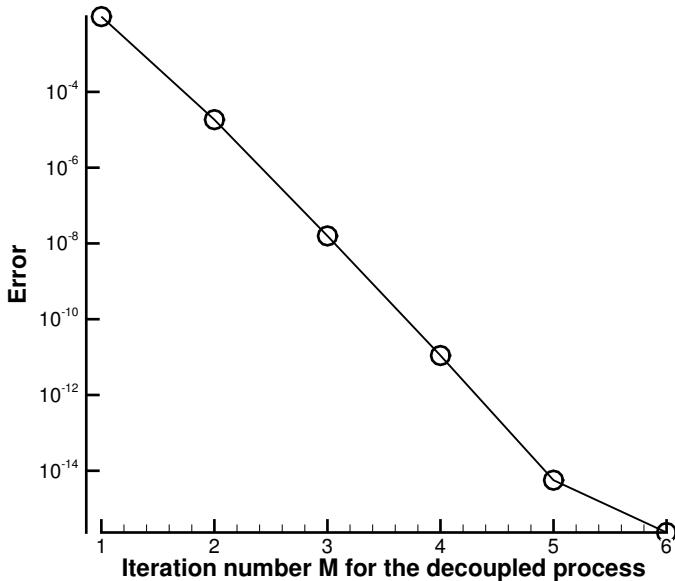


图 7.7: 算例 ?? 中迭代过程收敛曲线

Example 7.3.

该算例我们研究一个拥有更复杂波系的问题 [21, 144, 302, 330]。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

$$(\rho, u, p, z) = \begin{cases} (2, 4, 40, 0), & x \leq 10, \\ (3.64282, 6.2489.54.8244, 0), & 10 < x \leq 20 \\ (1, 0, 1, 1), & x > 20 \end{cases}$$

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 ?? 和图 ?? 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，我们注意到，

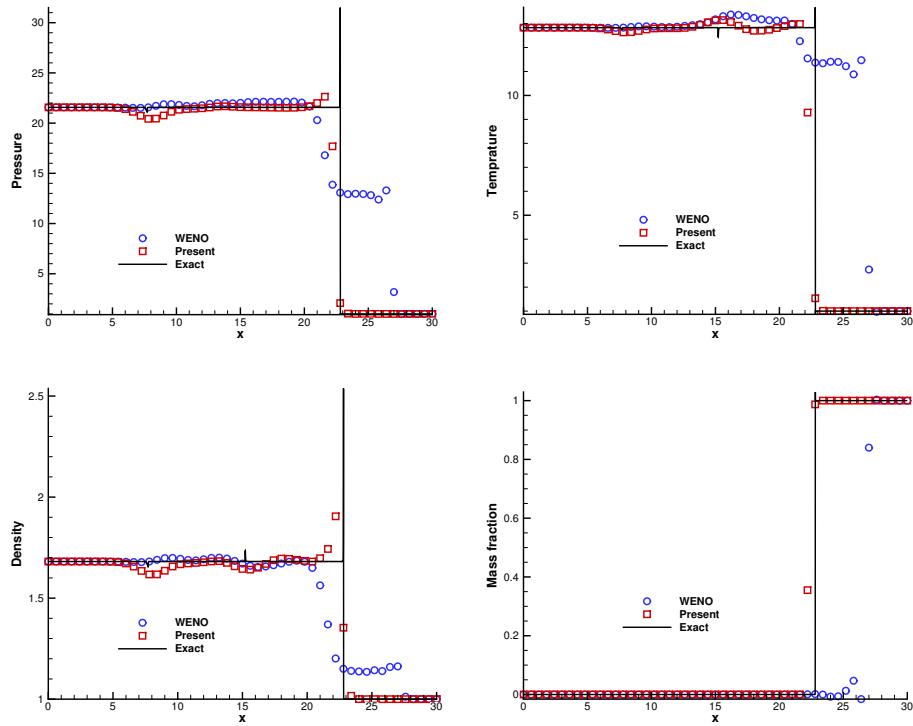


图 7.8: 算例 ?? 的计算结果, $T = 1.8$, $N = 50$

采用了传统方法, 爆轰波已经传出了右侧边界。

Example 7.4.

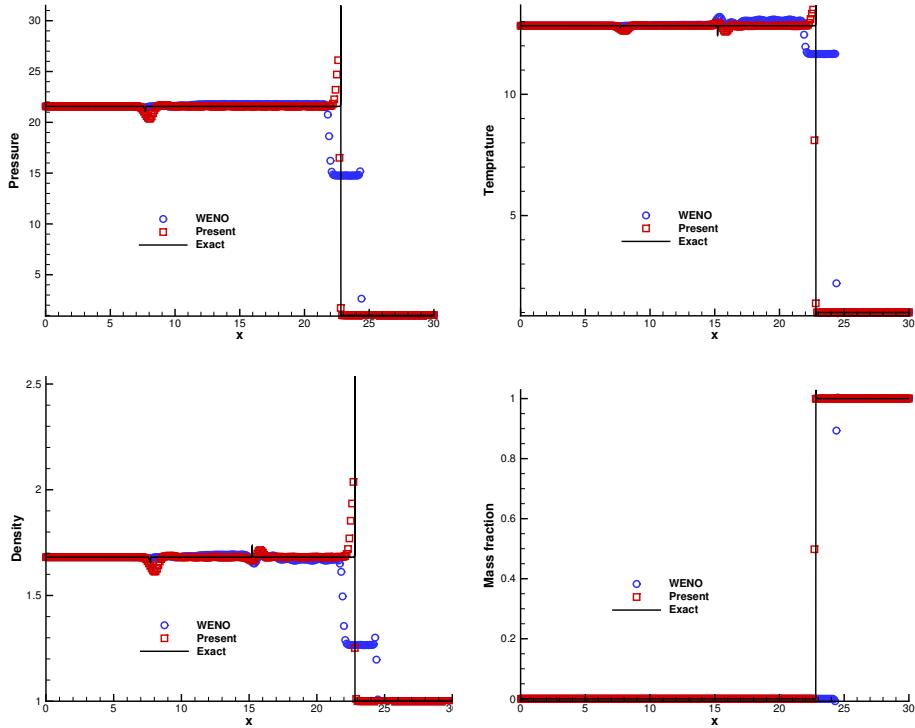
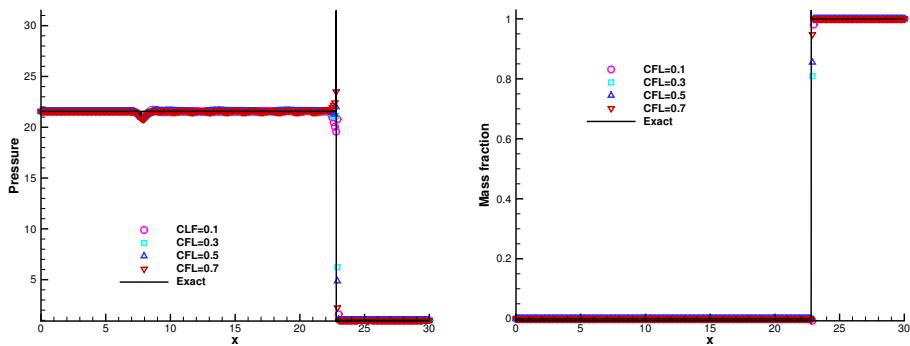
该章节最后一个一维算例计算的是爆轰波和波动波形间的相互作用 [20, 302], 该算例采用 Heaviside 源项模型, 用到的参数为

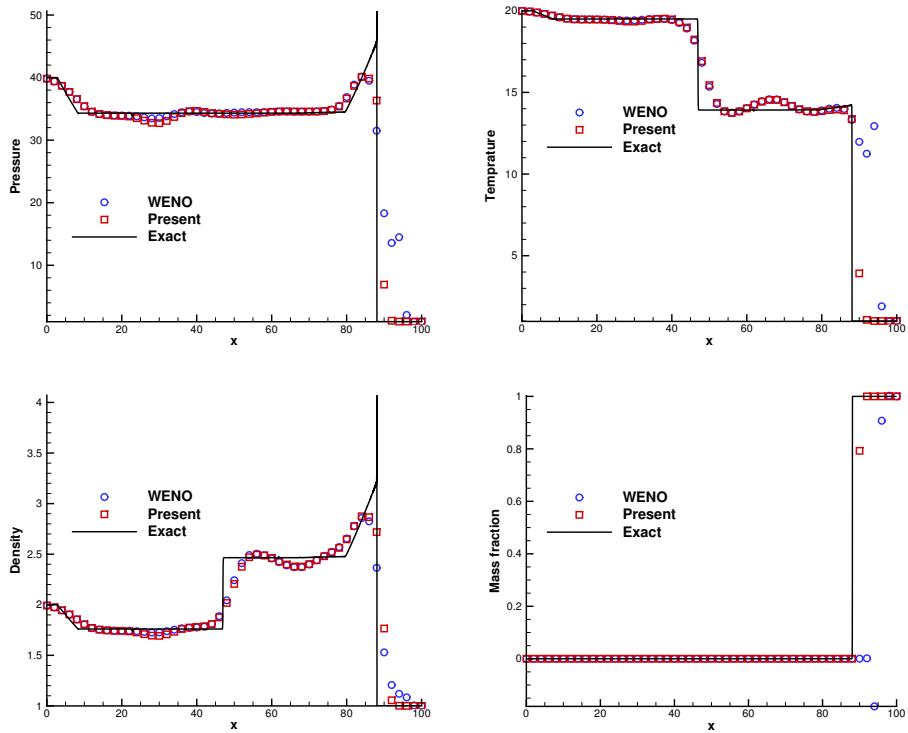
$$(\gamma, q_0, 1/\epsilon, T_{ign}) = (1.2, 50, 1000, 3)$$

初始条件为

$$(\rho, u, p, z) = \begin{cases} (1.79463, 3.0151, 21.53134, 0), & x \leq \frac{\pi}{2} \\ (3.64282, 6.2489, 54.8244, 0), & x > \frac{\pi}{2} \end{cases}$$

相同的, 我们采用 $N = 10,000$ 的结果作为参考解。图 ?? 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

图 7.9: 算例 ?? 的计算结果, $T = 1.8$, $N = 300$ 图 7.10: 算例 ?? 的计算结果, $100K_0$, $T = 1.8$, $N = 300$

图 7.11: 算例 ?? 的计算结果, $T = 8$, $N = 50$

面, 而新的方法在光滑区和间断区都有很好的结果。

Example 7.5.

下面考虑一个二维爆轰波算例 [20, 302, 330], 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, $\gamma, q_0, K_0, T_{ign}$ 等参数和算例??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 ρ_b , u_b 和 p_b 都是通过方程 (??) 计算得到。

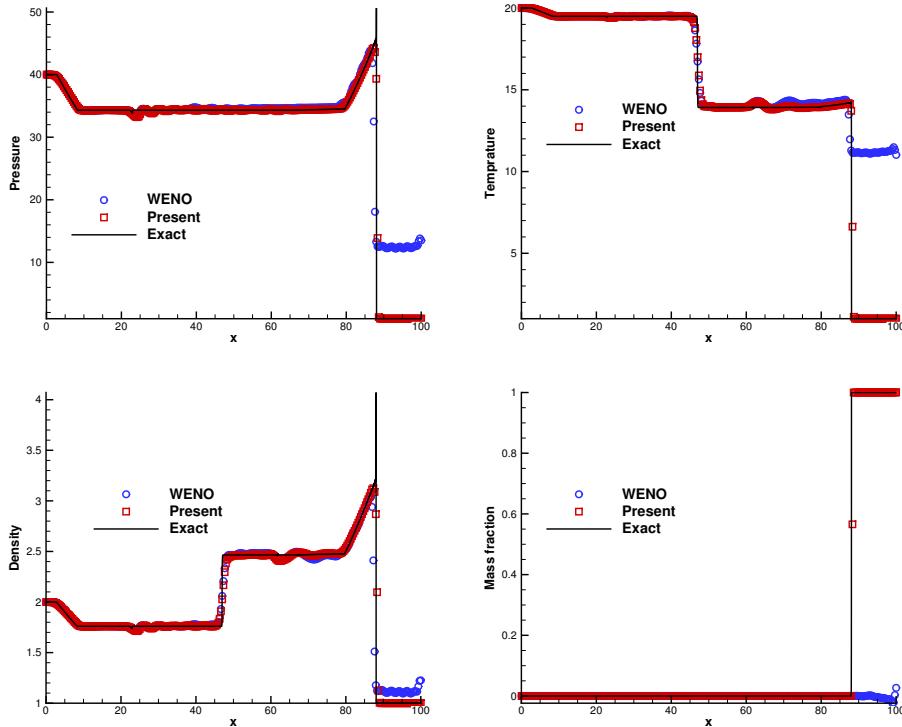


图 7.12: 算例 ?? 采用 $100/\epsilon$ 的计算结果, $T = 8$, $N = 300$

参考解是采用传统方法在 $N = 2000 \times 400$ 网格下计算得到的。图 ?? 给出初始时刻和最终时刻 ($t = 1.4 \times 10^{-7}$) 的参考结果。图 ?? 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, 在不同网格精度下, 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 ?? 中给出传统方法和新的方法采用 $N = 600 \times 200$ 网格, 在线 $y = 0.005$ 上的计算结果, 可以看到, 新方法计算结果很好的吻合于参考解, 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问题。

Example 7.6.

接下来考虑另外一个在文献 [21, 131] 中分析过的二维问题。该问题采用

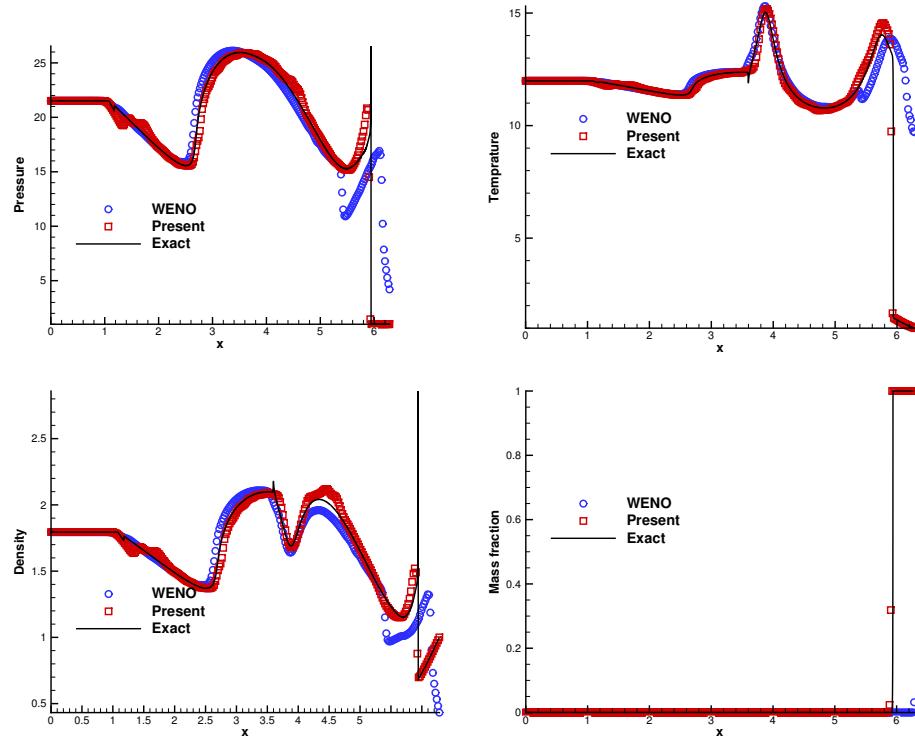


图 7.13: 算例 ?? 的计算结果, $T = \pi/2$, $N = 300$

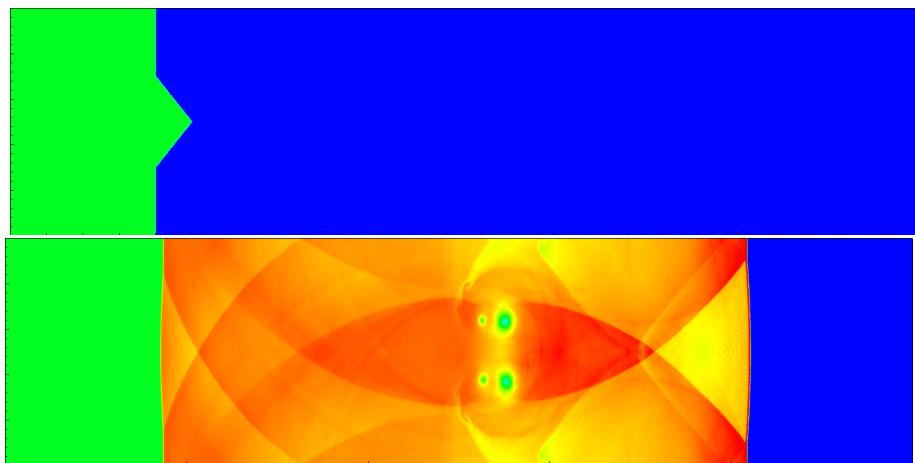


图 7.14: 算例 ?? 的密度等值线图, 采用传统方法, $T = 0$ 和 $T = 1.4 \times 10^{-7}$, $N = 2000 \times 400$

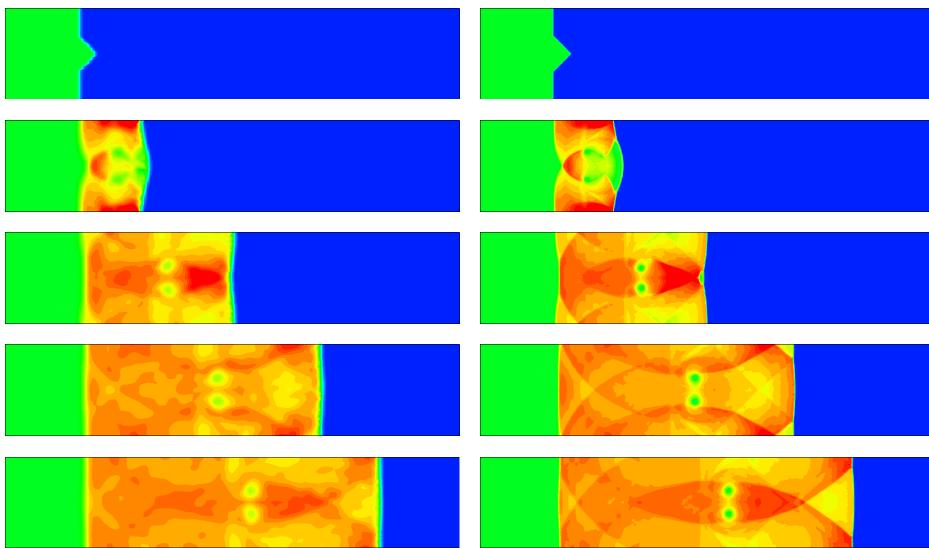


图 7.15: 算例 ??, 新的方法在时刻 $0, 0.25 \times 10^{-7}, 0.7 \times 10^{-7}, 1.12 \times 10^{-7}$ 和 1.4×10^{-7} 的计算结果。左侧: $N = 150 \times 50$, 右侧: $N = 600 \times 200$

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

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

该算例求解的是一道在球面爆轰波在矩形区域传播问题。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 ?? 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 ?? 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

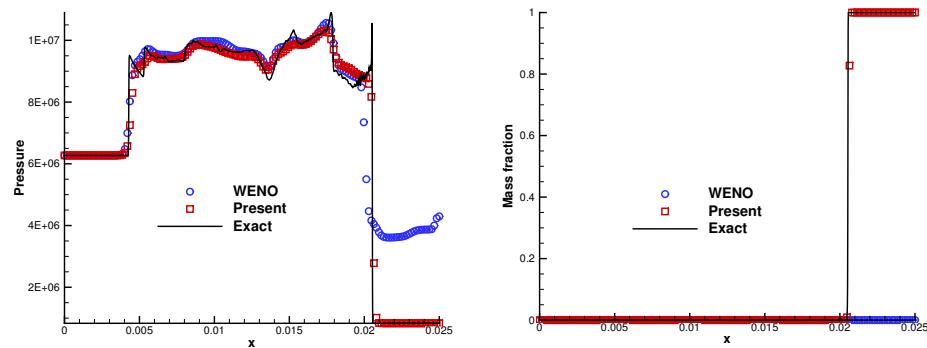


图 7.16: 算例??, 不同方法在线 $y = 0.0025$ 上的计算结果, $T = 1.4 \times 10^{-7}$

组分质量分数都能很好的吻合于参考解, 而传统方法由于数值刚性问题, 导致质量分数曲线出现了完全不同的表现。

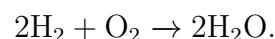
7.5.3 固定比热比多组分模型算例

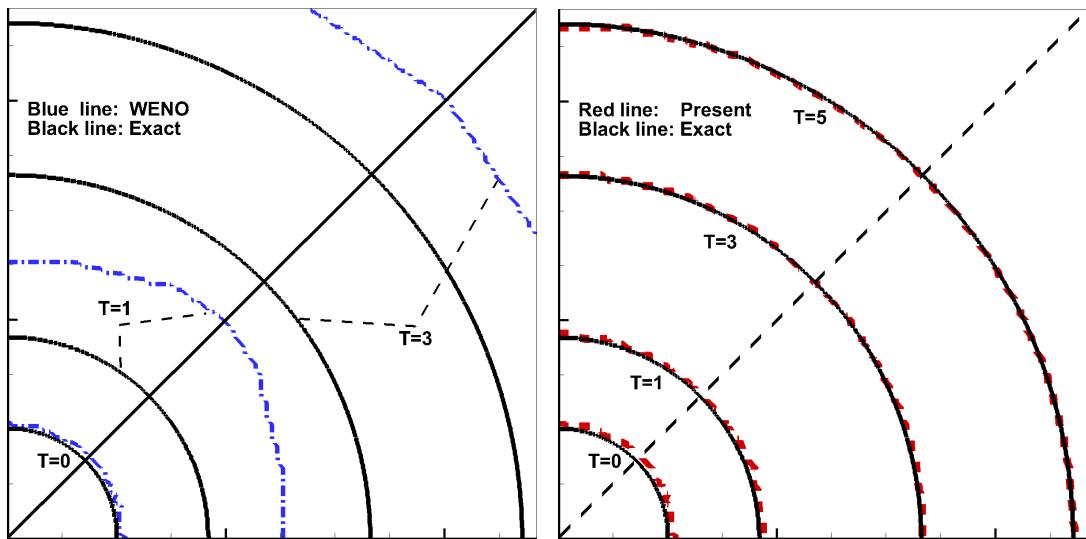
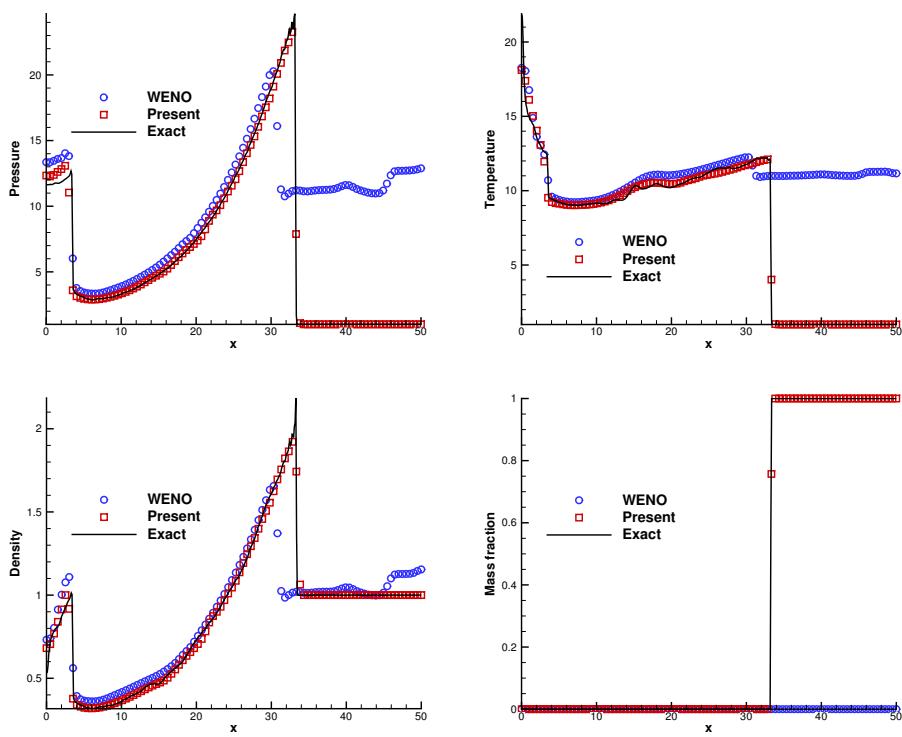
在上一小节的总包反应模型计算中, 由于反应速率和组分是正比关系, 因此在刚性问题中, 较大的反应速度导致整个反应区域都被压缩到激波区域, 无法识别, 这在上面所有的算例中都能看出。因此, 对于采用了总包反应模型的刚性问题, 甚至可以采用无厚度的界面模型进行追踪。

我们在章节 1.1.4 中给出了固定比热比多组分反应模型的相关公式, 公式 (1.13) 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, 即便在空间刚性问题中, 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 7.7.

第一个多组分算例在文献 [22, 330] 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 7.17: 算例 ?? 在 $z = 0.5$ 上的质量分数曲线图 7.18: 算例 ?? 对角线上的计算结果对比, $T = 5$

源项采用 Heaviside 模型，用到的参数为

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

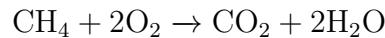
初始条件为

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

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 ?? 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，这可能是由于采用的高精度空间分裂格式造成数值耗散不足以导致非物理解的出现。然而，当我们如文献 [330] 中，将 q_{H_2} 从 100 增大到 300 时，采用了传统方法的结果（图 ??）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 7.8.

第二个多组分算例出于文献 [22]，反应模型为



所用到的反应参数如下

$$(\gamma, T_{\text{ign}}, 1/\epsilon, q_{\text{CH}_4}, q_{\text{O}_2}, q_{\text{CO}_2}, q_{\text{H}_2\text{O}}) = (1.4, 2, 500, 100, 0, 0)$$

$$(W_{\text{CH}_4}, W_{\text{O}_2}, W_{\text{CO}_2}, W_{\text{H}_2\text{O}}) = (16, 32, 44, 18)$$

初始条件为

$$(\rho, u, p, z_{\text{CH}_4}, z_{\text{O}_2}, z_{\text{CO}_2}, z_{\text{H}_2\text{O}}) = \begin{cases} (2, 10, 40, 0.325, 0, 0, 0.675), & x \leq 2.5 \\ (1, 0, 1, 0.1, 0.4, 0.6, 0), & x > 2.5 \end{cases}$$

该问题由一道爆轰波和紧随其后的接触间断和激波构成。参考解“exact”采用 $N = 10,000$ 网格求得。图 ?? 给出 $N = 200$ 网格在时刻 $T = 3$ 的计算结果。从

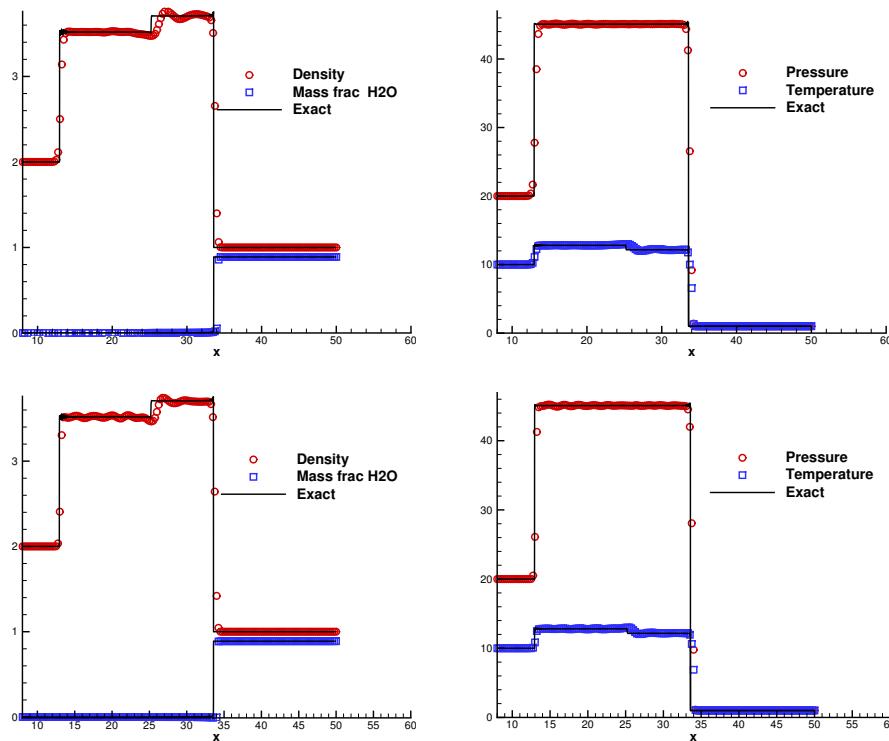
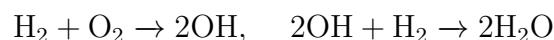


图 7.19: 算例 ?? 计算结果, $T = 4$, $N = 200$ 。上图: 传统方法; 下图: 新方法

图中可以看到, 采用新方法的计算结果和参考解吻合的很好, 而传统方法的结果中的爆轰波波速明显快于参考解。

Example 7.9.

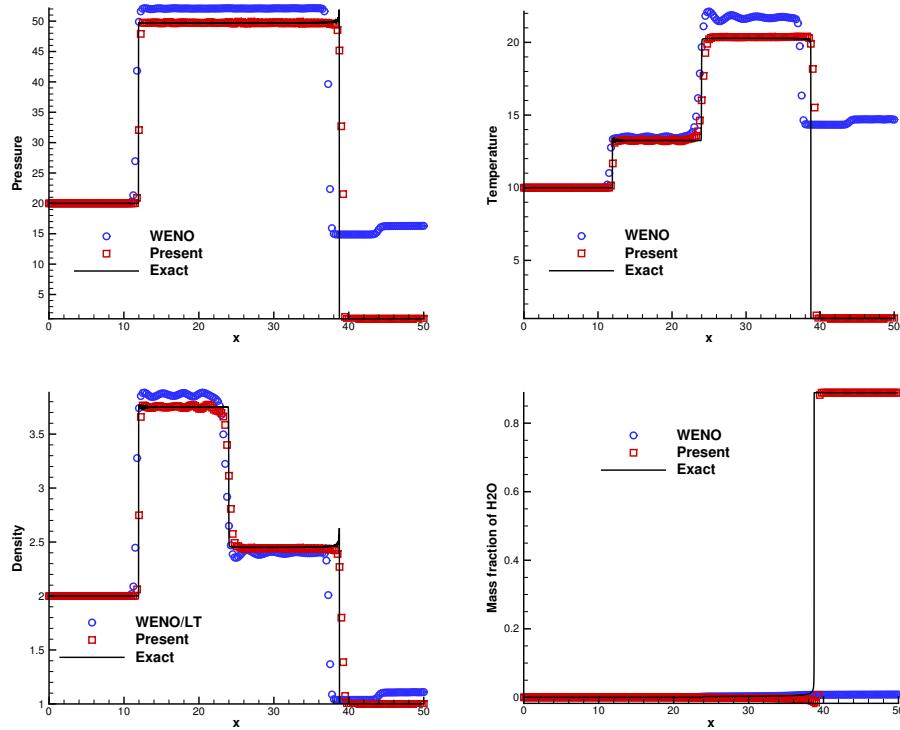
最后一个一维多组分算例同样引于文献 [22]。反应模型包含五个组分和两个反应



其中组分 N_2 作为缓冲剂。文献 [22] 中采用的参数为

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

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

图 7.20: 算例 ?? 采用 $k_{\text{H}_2} = 300$ 的计算结果, $T = 4$, $N = 200$

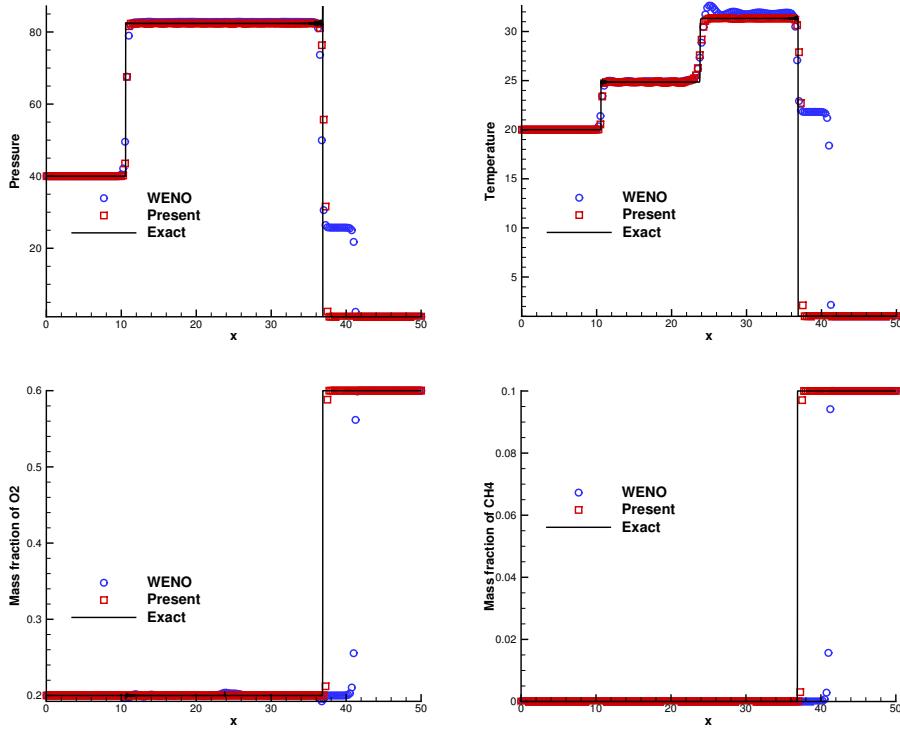
$$(W_{\text{H}_2}, W_{\text{O}_2}, W_{\text{OH}}, W_{\text{H}_2\text{O}}, W_{\text{N}_2}) = (2, 32, 17, 18, 28)$$

初始条件为

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

计算域我们采用 $[0, 50]$ 。参考解“exact”采用 $N = 10,000$ 网格得到。图 ?? 给出压力、温度、 O_2 和 OH 的质量分数。可以看到，采用文献 [22] 中的参数，两种方法都能的到正确的结果，但是传统方法会产生更多的振荡。

如果我们选用文献 [330] 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 ?? 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。

图 7.21: 算例?? 的计算结果, $T = 3$, $N = 200$ **Example 7.10.**

最后, 我们研究一个二维算例, 该算例引于文献 [22], 用到的所有常数都和算例 ?? 中相同。初始条件为

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

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 ?? 给出新方法在网格 $N = 300 \times 50$ 下,

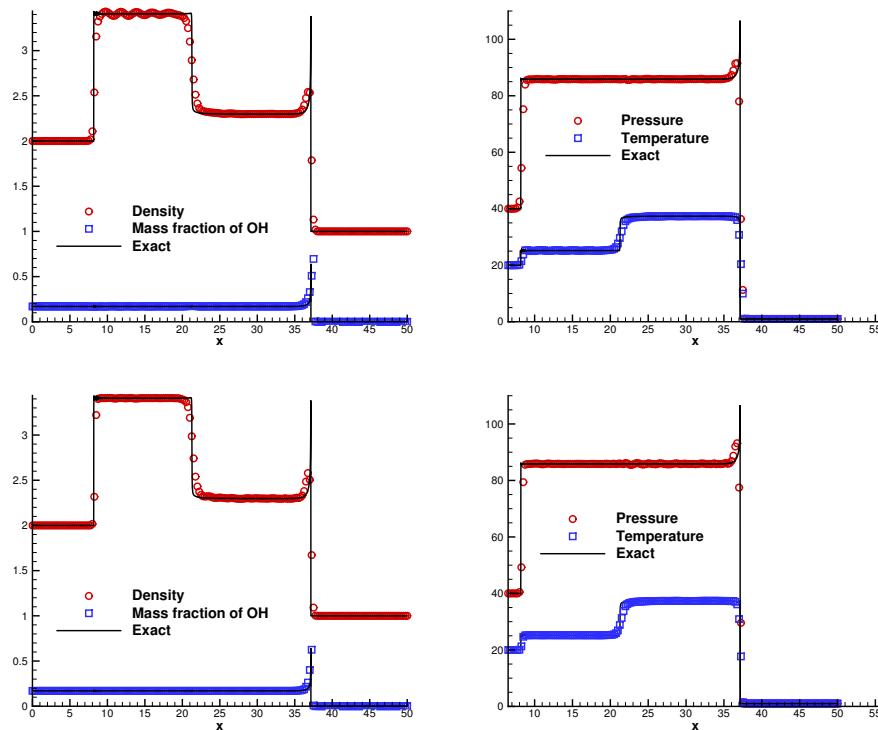


图 7.22: 算例 ?? 计算结果, $T = 3$, $N = 200$ 。上图: 传统方法; 下图: 新方法

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 ?? 给出截取线 $y = 12.5$ 上的结果, 通过对比可以看到, 新的方法结算结果和参考解吻合的非常好。

7.6 小结

在本章中我们首先分析了化学反应流中空间刚性产生的原因。接下来, 我们提出一种新型的分裂方法, 将反应 Euler 方程分裂为 Euler 部分、组分对流部分和反应部分三个具有不同求解特点的部分。针对于组分对流步中数值耗散对虚假物理理解产生的决定性作用, 我们将第 ?? 中提出 DIP 方法应用在该方程求解中, 结合高精度的 Euler 方程求解方法和稳定的反应步 ODE 方程 3TNP 求解方法可以很好的求解反应 Euler 方程, 避免非物理结果的产生。算例显示, 即

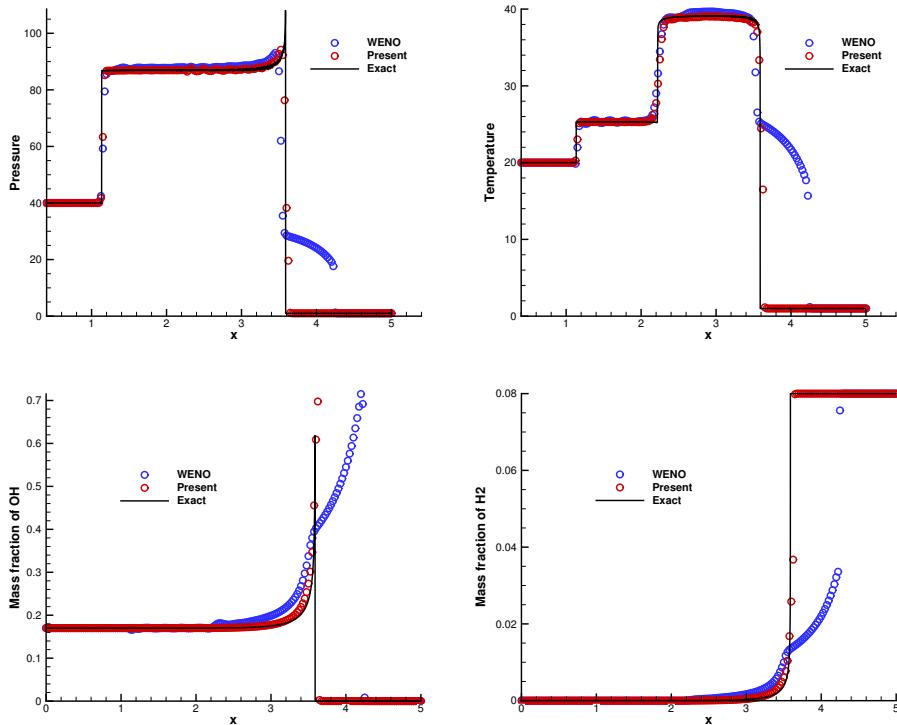


图 7.23: 算例 ?? 采用 $T_{\text{ign}} = 1.5$ 和 $q_{\text{H}_2} = -50$ 的计算结果。 $T = 3$, $N = 200$

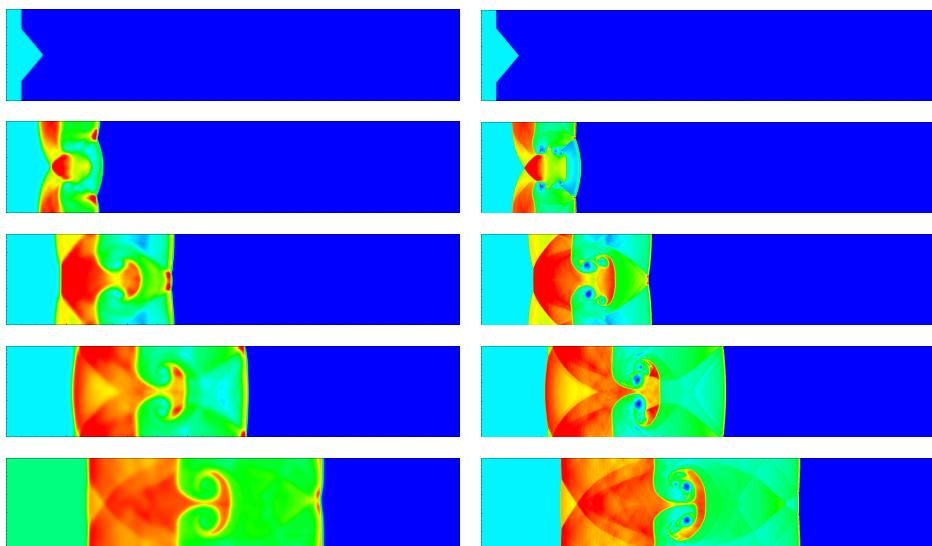


图 7.24: 算例 ?? 在时刻 $T_1 = 0, T_2 = 2, T_3 = 4, T_4 = 6$ 和 $T_5 = 8$ 的密度等值线图。左图: 新方法, $N = 300 \times 50$, 右图: 传统方法, $N = 1500 \times 250$

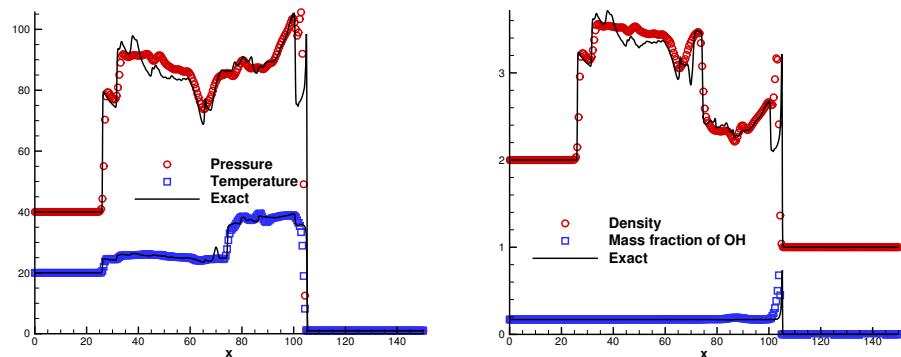


图 7.25: 算例 ?? 中在线 $y = 12.5$ 上的计算结果, $T = 8$, $N = 300 \times 50$

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结果。

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，我们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，通常不会出现上一章所遇到的非物理解，但是问题并没有因此变得简单，基元反应模型求解中会遇到更多的难点：

1. 首先不同组分间的空间尺度相差很大，如果网格不足，空间尺度较小的组分就难以准确计算，想要达到完全求解具有最小空间尺度的组分是极为困难的。关于尺度问题见附录 A。
2. 采用差分格式计算组分对流过程时，由于数值耗散和源项的作用，并不能保证组分的守恒。
3. 基元反应模型中的源项 ODE 方程时间刚性问题比上一章采用简单反应模型时更为严重。

针对于以上的各种问题，我们在前言 1.4.3.4 中有更详细的介绍。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，而遇到的空间问题归根结底也都是由于网格不足和方法中的数值耗散造成的。因此，我们将上一章提出的求解方法应用在基元反应模型爆轰求解中。

8.1 基元反应模型中的热力学参数

在前言 1.1.4 中，我们给出了基元反应模型的源项形式和状态方程，但是在基元反应模型中，每种组分的热力学属性并不相同，这导致了整体的热力学状态的变化，而每种组分的热力学属性通常由实验和拟合得到，本文采用 JANAF [273] 给出数据和拟合公式。

摩尔热容为

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

摩尔焓和摩尔熵都可以通过摩尔热容积分得到

$$\begin{aligned} H_i(T) &= H_i^f + \int_0^T C_{pi}(s)ds \\ S_i(T) &= S_i^f + \int_0^T \frac{C_{pi}(s)}{T}ds \end{aligned} \quad (8.2)$$

将方程 (C.1) 带入 (2.2) 可以得到摩尔焓

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

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 C。

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 (1.19) 联立，可以得到一个新的函数

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

问题转换成求解 $f(T) = 0$ ，本文采用牛顿迭代法进行求解。

由于采用分裂方法 (章节 ??)，对流过程和反应过程是独立的，因此化学反应过程可以看成是一个定容过程 [246]。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

$$\begin{cases} \frac{de}{dt} = 0 \\ \frac{d\rho_i}{dt} = \omega_i \end{cases} \quad (8.7)$$

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 (2.12) 可以显式的求出下一步时间的温度，无需采用迭代。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，我们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 H_2 , O_2 , O , H , OH , HO_2 , H_2O_2 , H_2O 和 Ar , 21 反应的 BW 氢氧爆轰模型 [16]，具体参数见表 2.1。

表 8.1: 不同 ODE 格式精度分析

| | | | | | |
|-----|------------------------|-----------------------|--|--------|---|
| 1. | $H+O_2=OH+O$ | 3.52×10^{16} | -0.7 | 17.07 | |
| 2. | $H_2+O=OH+H$ | 5.06×10^4 | 2.67 | 6.29 | |
| 3. | $OH+OH=H_2O+O$ | | $k=5.46 \times 10^{11} \exp(0.00149T)$ | | |
| 4. | $H_2+OH=H_2O+H$ | 1.17×10^9 | 1.3 | 3.626 | |
| 5. | $H+O_2+M=HO_2+M$ | 6.76×10^{19} | -1.42 | 0.0 | b |
| 6. | $H+HO_2=OH+OH$ | 1.70×10^{14} | 0.0 | 0.874 | |
| 7. | $H+HO_2=H_2+O_2$ | 4.28×10^{13} | 0.0 | 1.411 | |
| 8. | $OH+HO_2=H_2O+O_2$ | 2.89×10^{13} | 0.0 | -0.497 | |
| 9. | $H+H+M=H_2+M$ | 1.80×10^{18} | -1.0 | 0.0 | c |
| 10. | $H+OH+M=H_2O+M$ | 2.20×10^{22} | -2.0 | 0.0 | b |
| 11. | $HO_2+HO_2=H_2O_2+O_2$ | 3.02×10^{12} | 0.0 | 1.39 | |
| 12. | $H_2O_2+M=OH+OH+M$ | 1.20×10^{17} | 0.0 | 45.50 | d |
| 13. | $H_2O_2+OH=H_2O+HO_2$ | 7.08×10^{12} | 0.0 | 1.43 | |
| 14. | $O+HO_2=OH+O_2$ | 2.00×10^{13} | 0.0 | 0.0 | |
| 15. | $H+HO_2=O+H_2O$ | 3.10×10^{13} | 0.0 | 1.72 | |
| 16. | $H+O+M=OH+M$ | 6.20×10^{16} | -0.6 | 0.0 | b |
| 17. | $O+O+M=O_2+M$ | 6.17×10^{15} | -0.5 | 0.0 | b |
| 18. | $H_2O_2+H=H_2O+OH$ | 1.00×10^{13} | 0.0 | 3.59 | |
| 19. | $H_2O_2+H=HO_2+H_2$ | 4.79×10^{13} | 0.0 | 7.95 | |
| 20. | $O+OH+M=HO_2+M$ | 1.00×10^{16} | 0.0 | 0.0 | |
| 21. | $H_2+O_2=OH+OH$ | 1.70×10^{13} | 0.0 | 47.78 | |

8.3.1 新方法有效性的验证

为了验证新方法的有效性，本小节中分别计算四种不同工况下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。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 H_2 , O_2 和 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。点火区参数为 $P_{ign} = 28.0P_0$ 、 $\rho_{ign} = 5.0\rho_0$ 和 $T_{ign} = 13.0T_0$ 。

由于 $C-J$ 理论解和试验结果大约仅有 10% 左右的误差 [112]，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

和波后参数

$$\begin{aligned}\rho_0(D - u_0) &= \rho_1(D - u_1) \\ p_1 - p_0 &= \rho_0(D - u_0)(u_1 - u_0) \\ e_1 - e_0 &= \frac{1}{2}(p_1 + p_0)(\nu_0 - \nu_1) + Q \\ e &= e(p, \nu) \\ D - u_1 &= c_1\end{aligned}\tag{8.13}$$

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

$$P_N = 2 \frac{\rho_0 D_j^2}{\gamma + 1} \tag{8.14}$$

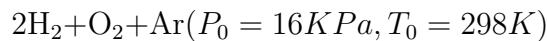
其中 D_j 为爆轰波波速， γ 为反应物比热比。

Example 8.1.

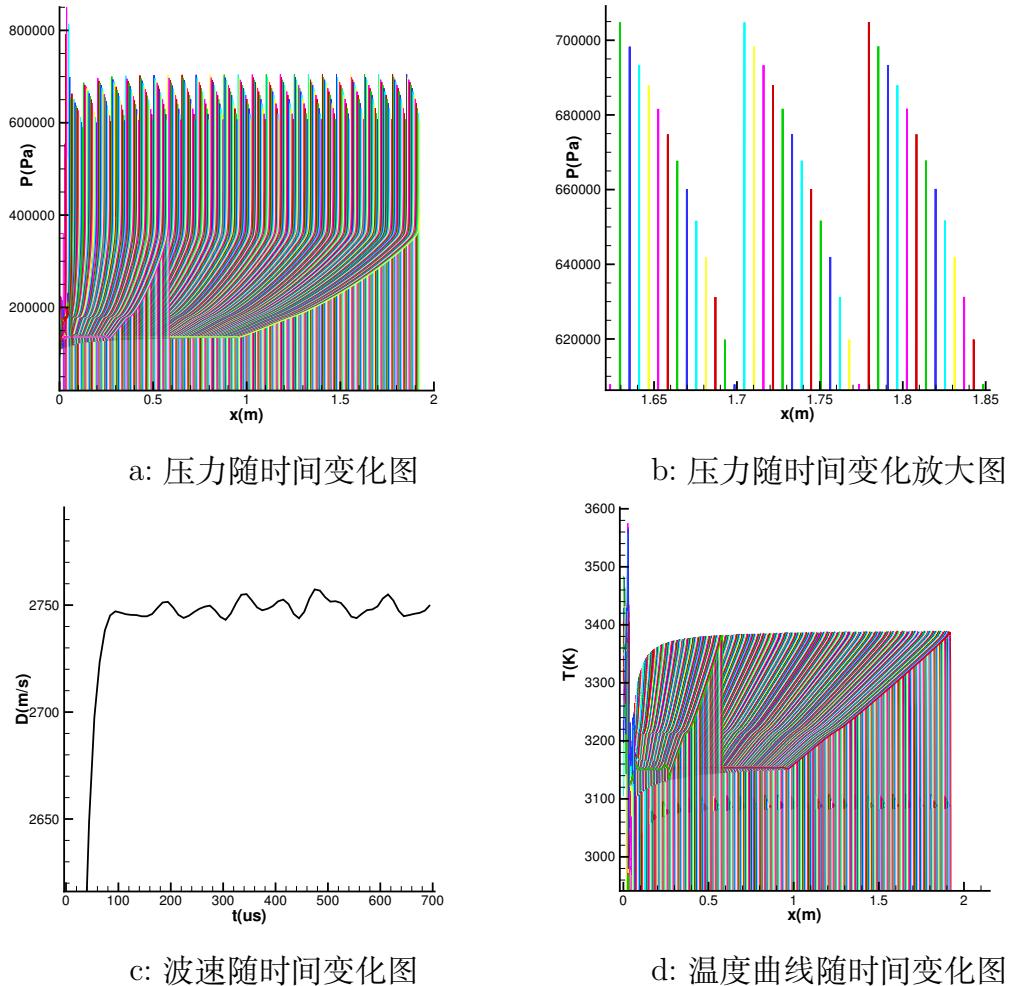


首先研究不含稀释剂的 $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ 工况 [286, 300]，计算区域为 $[0, 2m]$ ，计算时长为 $T = 700\mu\text{s}$ ，采用 $N = 8,000$ 的网格。图 2.1.a 和图 2.1.b 给出了压力随时间发展的计算结果和局部放大图，图 2.1.c 给出爆轰波速度随时间变化曲线。如文献 [112] 所讨论，该算例压强和波速并不能稳定收敛，而是波动的，波速平均值为 $D_j = 2750\text{m/s}$ 和试验结果 [2, 27] 及理论参考解都很相近。由 ZND 理论计算求得的冯纽曼尖 $P_N = 610\text{KPa}$ ，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 2.1.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.

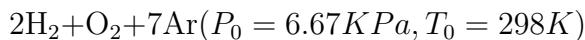


有较多学者对该算例进行过研究 [72, 82, 194, 217, 352]。该算例计算域为 $[0, 4m]$ ，计算时长为 $T = 1,600\mu\text{s}$ 。该计算采用 $N = 12,000$ 的网格量。采用文献 [83, 113] 中给出的理论波速和实验波速作为参考。图 2.2.a 和图 2.2.b 给出压力曲线随时间的发展，最大压力经过计算开始的振荡后，稳定升高。在爆轰波传播到 $2m$ 时 ($1000\mu\text{s}$) 压力曲线尚未达到峰值，因此需要给出更长时间的

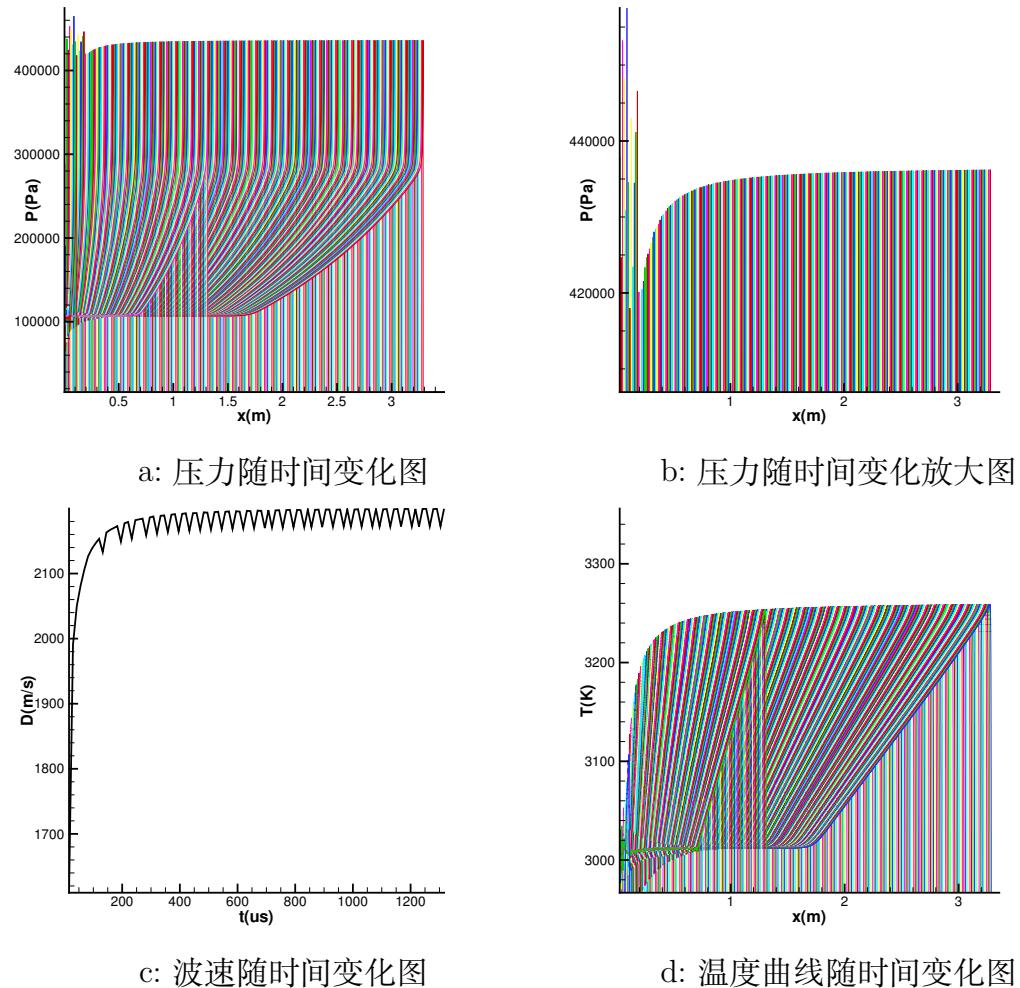
图 8.1: $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ 算例计算结果

结果。图 2.2.c 给出速度发展曲线，可以看到速度趋势虽然收敛，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 2.2.d 中可以看到，该算例温度稳定在 $3260K$ 。

Example 8.3.

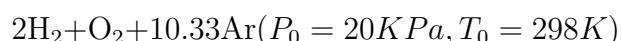


在文献 [141, 217, 299] 中有关于该算例的详细计算结果。计算区域选取为 $[0, 3m]$ ，计算时间 $T = 1800\mu\text{s}$ ，计算采用 $N = 12,000$ 网格量。文献 [82] 中给出的实验波速为 1550 m/s 。图 2.3.a 和图 2.3.b 给出压力发展曲线和速度曲线，从中可以看到，大约在 $500\mu\text{s}$ 后速度呈现有规律的振荡，平均速度在 1550 m/s ，

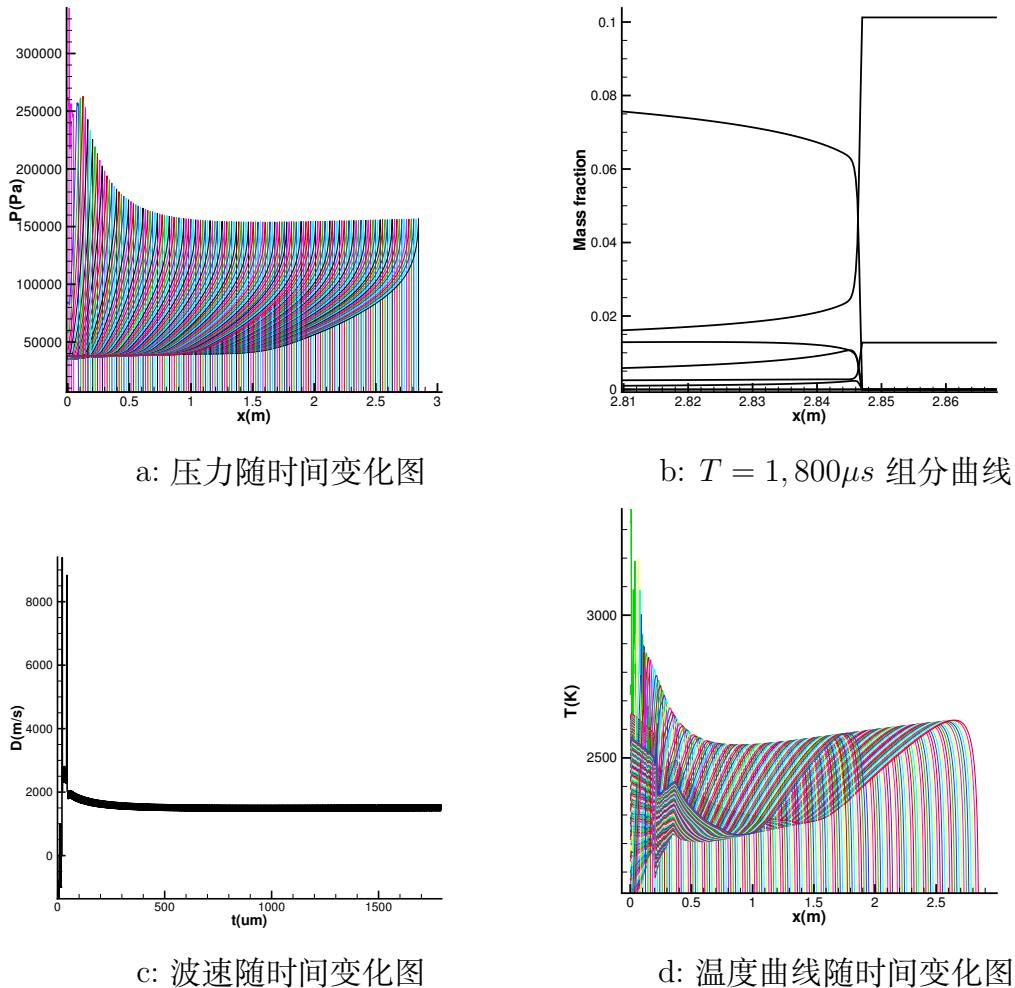
图 8.2: $2H_2 + O_2 + Ar$ 算例计算结果

压力曲线同样呈现出规律的结果，峰值不再变化，且和理论峰值接近。图 2.3.c 给出温度曲线随时间演变情况，可以看到温度收敛到 $T = 2600K$ 附近。最后在图 2.3.d 中给出了最终时刻的组分曲线。

Example 8.4.



在文献 [113] 中给出了该条件下的实验结果，平均实验波速为 $1557m/s$ ，通过 C-J 理论得出的参考波速为 $1548ms$ 。我们采用 $[0, 3m]$ 的计算区域和 $N = 1,2000$ 的网格量，计算时间为 $T = 1800\mu s$ 。图 2.4.a、图 2.4.b 和图 2.4.c 分别给出压力，速度和温度发展曲线，可以看出，计算时间少于 $1500\mu s$ 时并不能

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

达到收敛的结果，最后的计算速度收敛在 1551m/s 和实验值及理论值都极为接近。最大压力值收敛在 450KPa ，温度收敛在 2700K 。在图 2.4.d 中我们给出最终时刻的组分分布曲线。

最后我们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 2.3 中。

8.3.2 新方法和传统方法在组分守恒性方面的比较

在该小节中我们选上小节中第四个算例，采用相同的网格 $N = 12000$ 和计算时间 $T = 1200\mu\text{s}$ ，对新方法和直接 WENO 方法进行比较。图 2.5、图 2.6 和

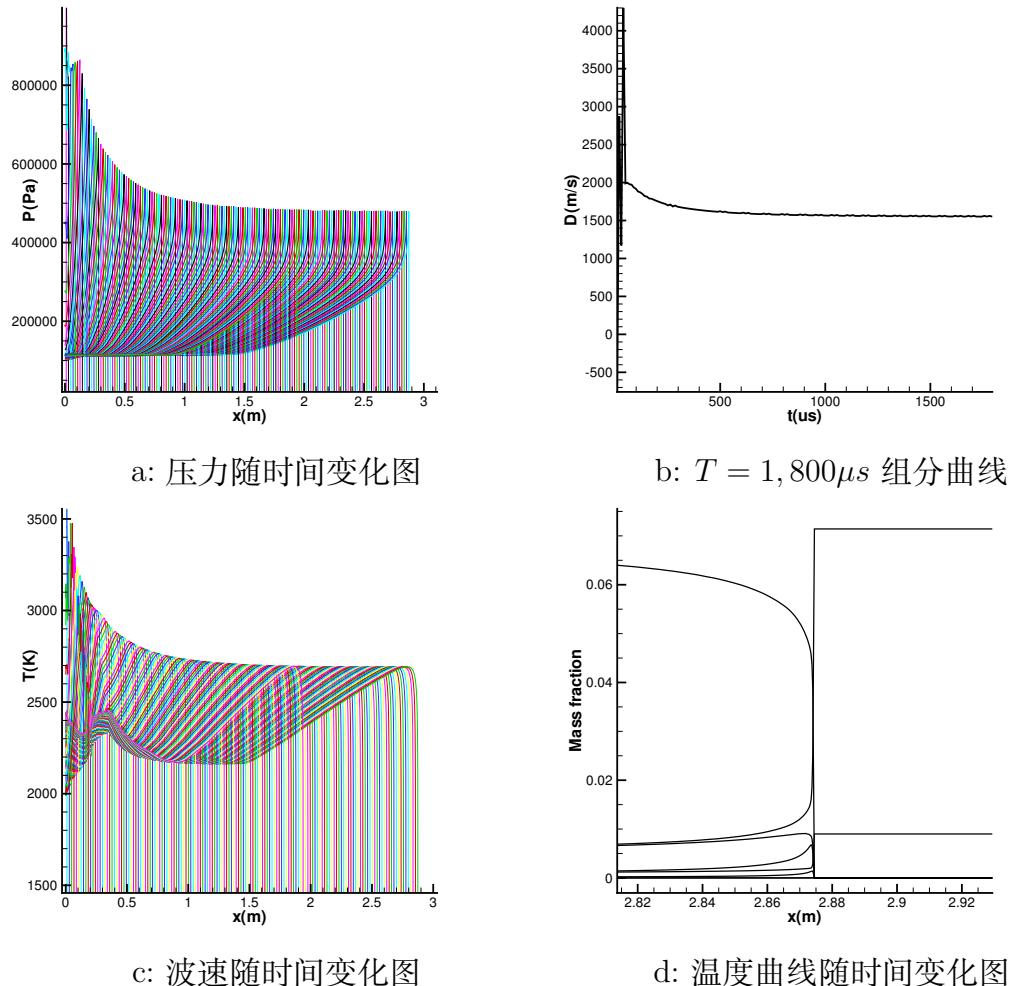
图 8.4: $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 10.33\text{Ar}$ 算例计算结果

表 8.3: 不同条件下理论值、计算值和实验值对比

| 组分 | $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ | $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + \text{Ar}$ | $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 7\text{Ar}$ | $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 10.33\text{Ar}$ |
|-------------------------|----------------------------|--|---|---|
| 压强 $K\text{Pa}$ | 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 $K\text{Pa}$ | 600-700 | 440 | 157 | 480 |
| 参考最大压力 $K\text{Pa}$ | 610 | 477 | 160 | 500 |

图 2.7 分别给出压力、密度、温度、波速变化和组分的对比结果，可以看到最终爆轰波速收敛到了相同的结果，压力峰值、密度和温度也几乎相同，由此也验证了新方法求解化学反应的有效性。从 H_2O 组分和 O_2 组分曲线放大图可以看到，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 2.7 中给出的 Ar 的组分曲线显示，传统格式约 1.5% 左右的误差，相比于我们采用的精细的网格，以及格式本身的高精度特性，误差已经较大。而新方法中 Ar 的最大误差不足 10^{-6} 。

8.3.3 新方法和传统方法在计算精度方面的比较

由于通常计算中，尤其在高维度问题的计算中，能采用的网格尺度会远大于上面计算用到的网格尺度，因此在这里我们验证在稀疏网格下新方法的效果。

首先我们验证上面的计算结果是否达到网格收敛，以便选用合理的参考解。这里采用 $N = 6000$ 网格量和 $N = 12000$ 网格量进行对比，图 2.8 给出两种网格下的计算结果，可以看到在 $N = 6000$ 网格下，计算结果已经收敛。因此将这一网格量下的计算结果作为参考解。

下面我们在网格 $N = 600$ 下，对比新方法和传统方法的计算结果，图 2.9 和图 2.10 分别给出压力、温度等物理量的对比，可以看到，新方法比传统方法具有好的精度效果。

8.3.4 新方法和传统方法在计算效率方面的比较

本小节我们分别研究：

1, DIP 方法对对流过程效率的影响，2, 摄动方法对源项 ODE 方程求解效率的影响，3, 采用定容燃烧假设对效率方面的影响。

我们采用 $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 10.33\text{Ar}$ 算例，计算网格选用 $N = 12,000$ 。

8.3.4.1 DIP 方法对对流过程效率的影响

对于传统方法 (章节 ??), 对流过程为 (过程 1):

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = 0 \quad (8.15)$$

其中

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

应用了 DIP 方法, 对流过程分为欧拉对流过程和组分对流过程两部分:

欧拉对流过程 (过程 2)

$$\frac{\partial \mathbf{U}_1}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_1}{\partial x} = 0 \quad (8.16)$$

其中

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

组分对流过程 (过程 3):

$$\frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial t} + u \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial x} = 0 \quad (8.17)$$

其中 $\mathbf{Z} = (z_1, z_2, \dots, z_{ns-1})^T$ 。

表 2.4 给出上面三个过程分别所需要的时间 (20 个循环), 可以看到尽管过程 3 需要求解 20 个方程, 所需要的时间相比于过程 1 来说几乎可以忽略, 但是由于过程 2 求解过程所占时间较多, 最后新方法在对流过程中可以节约 28.8%

的时间。显而易见的，随着反应复杂和对流方程增多，效率的改善会更加明显。

表 8.4: 对流不通过程所需时间 (20 次循环)

| | 过程 1 | 过程 2 | 过程 3 | 减少时间比例 |
|----|--------|-------|------|--------|
| 时间 | 1266ms | 898ms | 12ms | 28.8% |

8.3.4.2 摆动方法对 ODE 方程求解效率的影响

下面我们对比三阶 TNP 格式和一阶欧拉格式求解反应 ODE 方程的效率。经过对比，我们发现 1 步三阶 TNP 格式所需时间 (912ms) 和 20 步一阶欧拉格式所用时间 (1232ms) 相当。但是考虑到对于刚性 ODE 方程，例如在该算例中，我们通常需要多达 80 步左右的子时间步才能稳定计算，而采用三阶摄动格式，只需要 1 到 2 步即可达到稳定高精度求解。因此采用了 3TNP 格式，计算效率仍然有大幅度提高。

8.3.4.3 定容假设对温度求解的简化

由于算子分裂过程，化学反应和流动过程分别独立求解，因此化学反应实为一个定容燃烧过程 [246]，这样可以对温度求解过程进行简化（章节 2.2）。对于该算例，同样求解 20 个反应子步，如果采用迭代过程求解温度用时为 292ms，不采用迭代过程用时 157ms。

最后综合上面三部分，表 2.5 给出总体效率的改善情况。

表 8.5: 各种简化过程带来的节省时间

| | DIP 对流步 | TNP 反应步 | 定容假设 | 总计 |
|------|---------|---------|------|-------|
| 相对提升 | 28.8% | 66% | 46% | - |
| 总体提升 | 3.2% | 64.2% | 6.1% | 65.7% |

8.3.5 二维爆轰

在本章的最后我们计算两个二维爆轰算例，用以验证新方法在化学反应计算中的可靠性。

8.3.5.1 爆轰波胞格结构

预混爆轰的一个最重要的特点是其内在不稳定性，这种不稳定性会导致爆轰波的三维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 [240]。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 [343]，各类爆轰胞格尺寸都需要通过实验测量。

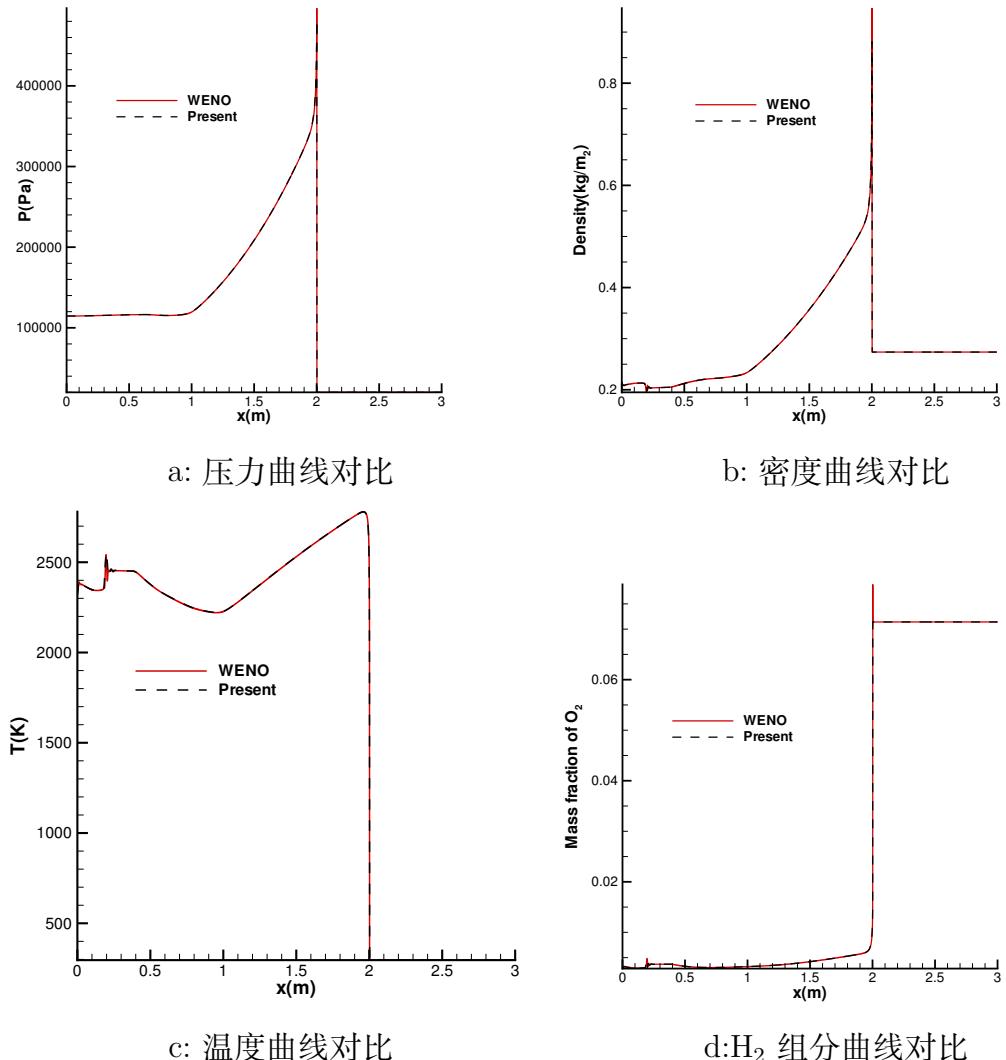
爆轰波胞格结构的数值模拟从 20 世纪 80 年代后期才开始展开，数值模拟中的主要难点包括，1，所需网格尺度过小导致计算量太大，2，需要模拟爆轰波中的细微结构，因此对格式的精度要求同样很高。目前为止，数值模拟结果都无法和实验结果进行定量比较，计算得到的胞格尺度都偏小，对于胞格需要进一步量化研究 [192]。

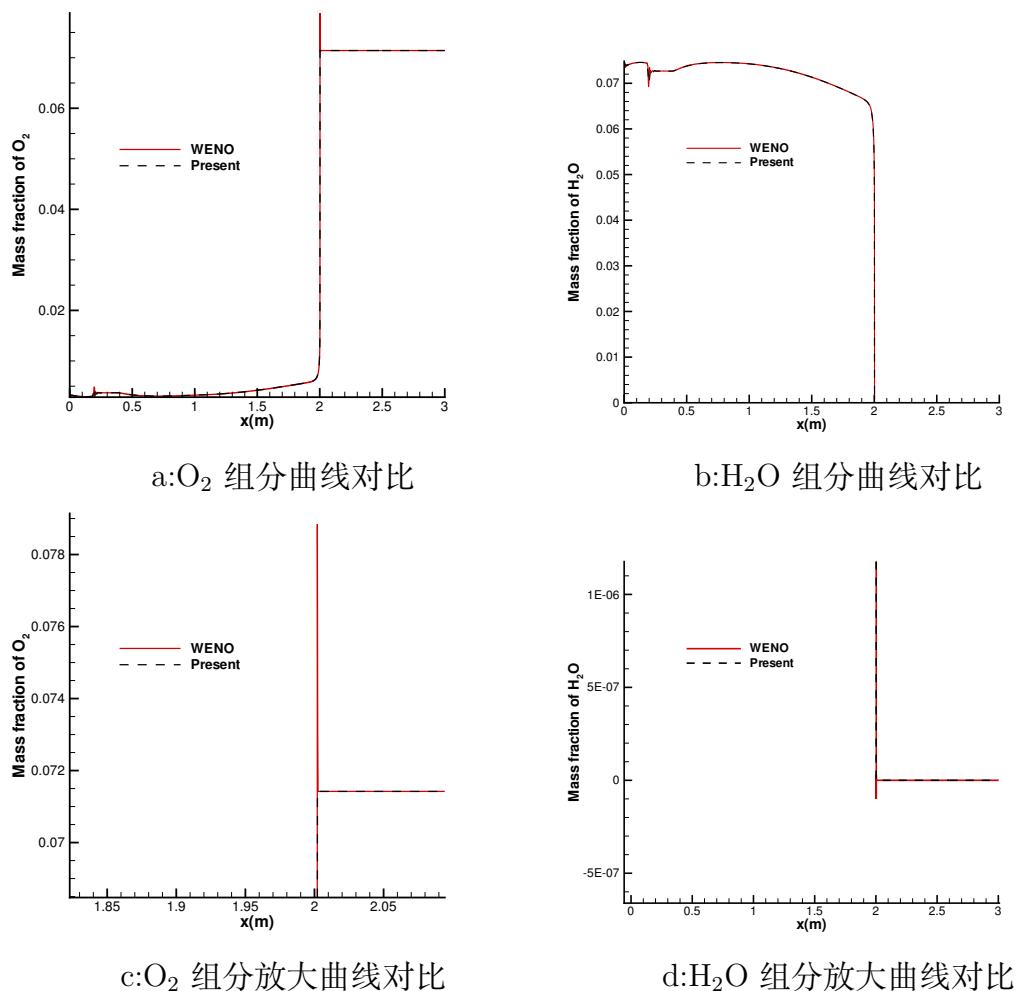
下面我们计算文献 [348] 给出的胞格结构研究算例，该算例采用和上节中第二个反应条件相似的条件，即 $2\text{H}_2+\text{O}_2+\text{Ar}(8\text{KPa}, 300\text{K})$ 。如图 2.12，在文献 [?]，中给出该条件下的计算结果和实验结果，实验结果中胞格并不是十分规则，胞格的长度、长宽比分别为 8.2cm 和 0.58。

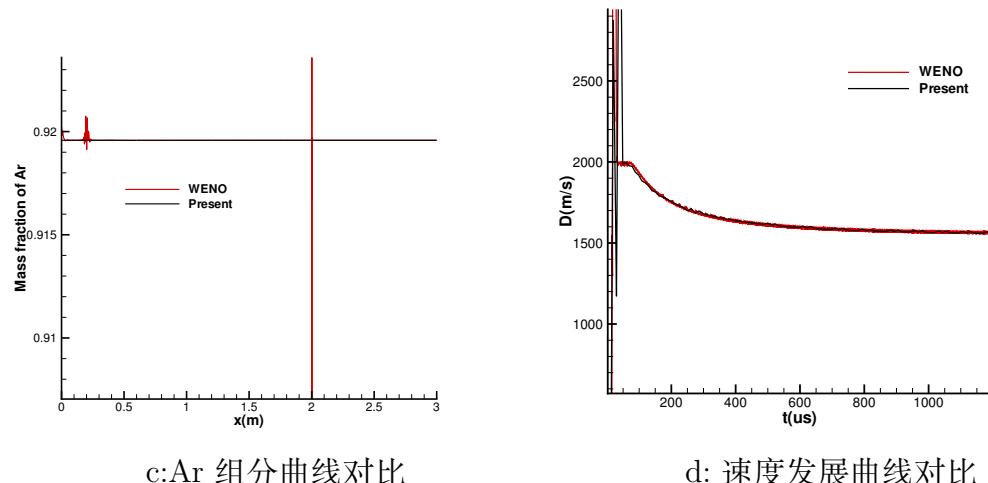
计算条件采用 $6\text{cm} \times 80\text{cm}$ 长管，为了更快的激发爆轰波的不稳定性，在 37.5cm 处有一块很小的密度扰动区域，该区域密度为周围的两倍，其它条件不变。计算采用 90×1200 的网格，图 ?? 给出压力最大值点既三波点的运动轨迹，可以看到，采用新方法能清晰的捕捉到胞格结构。和实验相似，数值结果中的胞格同样不规则，平均长度为 8.7cm，平均长宽比为 0.5，都和实验结果较为接近。

8.4 小结

本章中，我们将上一章中构造的基于 DIP 方法、数值摄动方法和分裂方法的新方法应用在采用了基元反应模型的爆轰波数值模拟中。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；同时新方法在效率方面同样具有显著的优势。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。

图 8.5: 2H₂+O₂+10.33Ar 算例对比结果

图 8.6: $2H_2 + O_2 + 10.33Ar$ 算例对比结果 2

图 8.7: $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 10.33\text{Ar}$ 算例对比结果 3

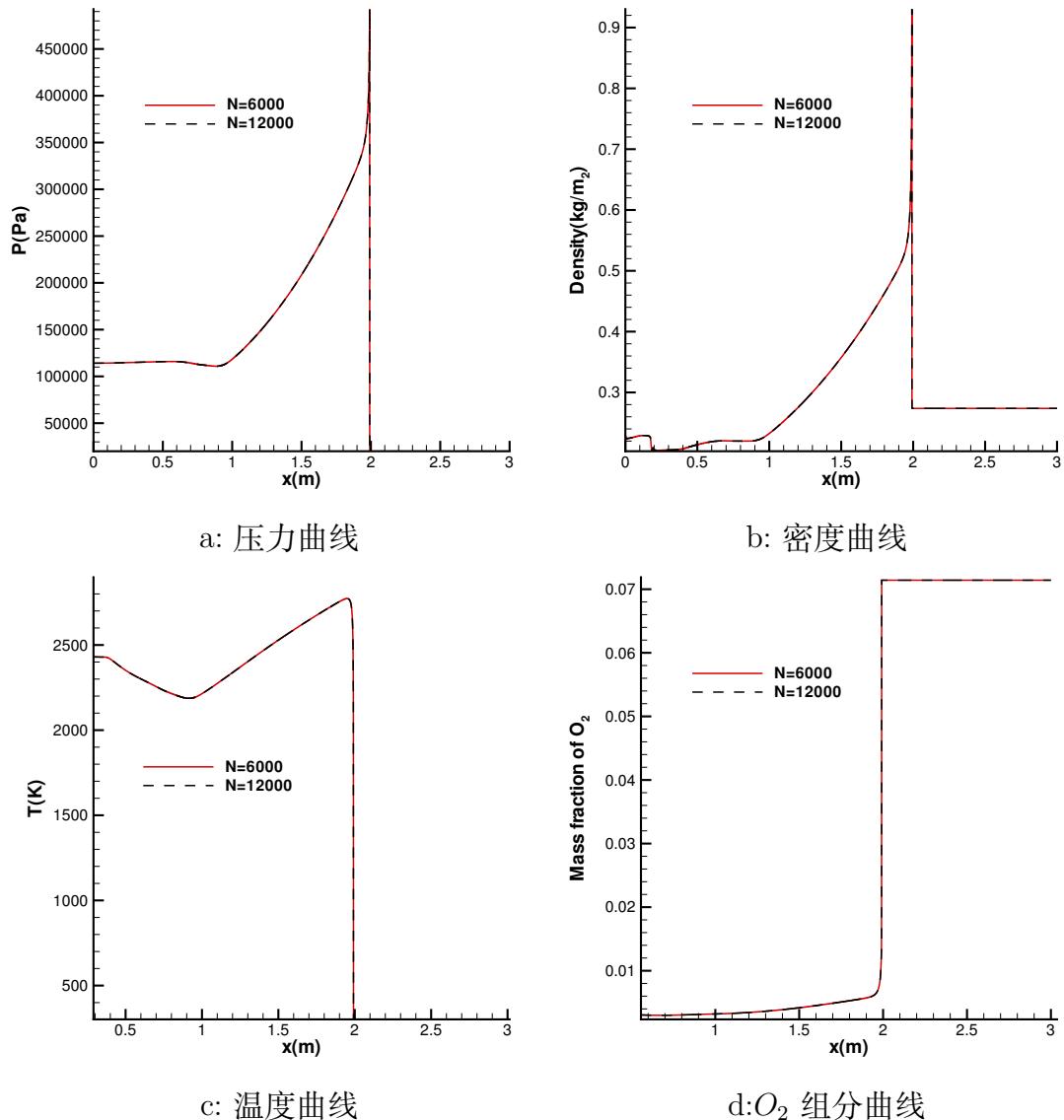


图 8.8: 不同网格下计算结果对比

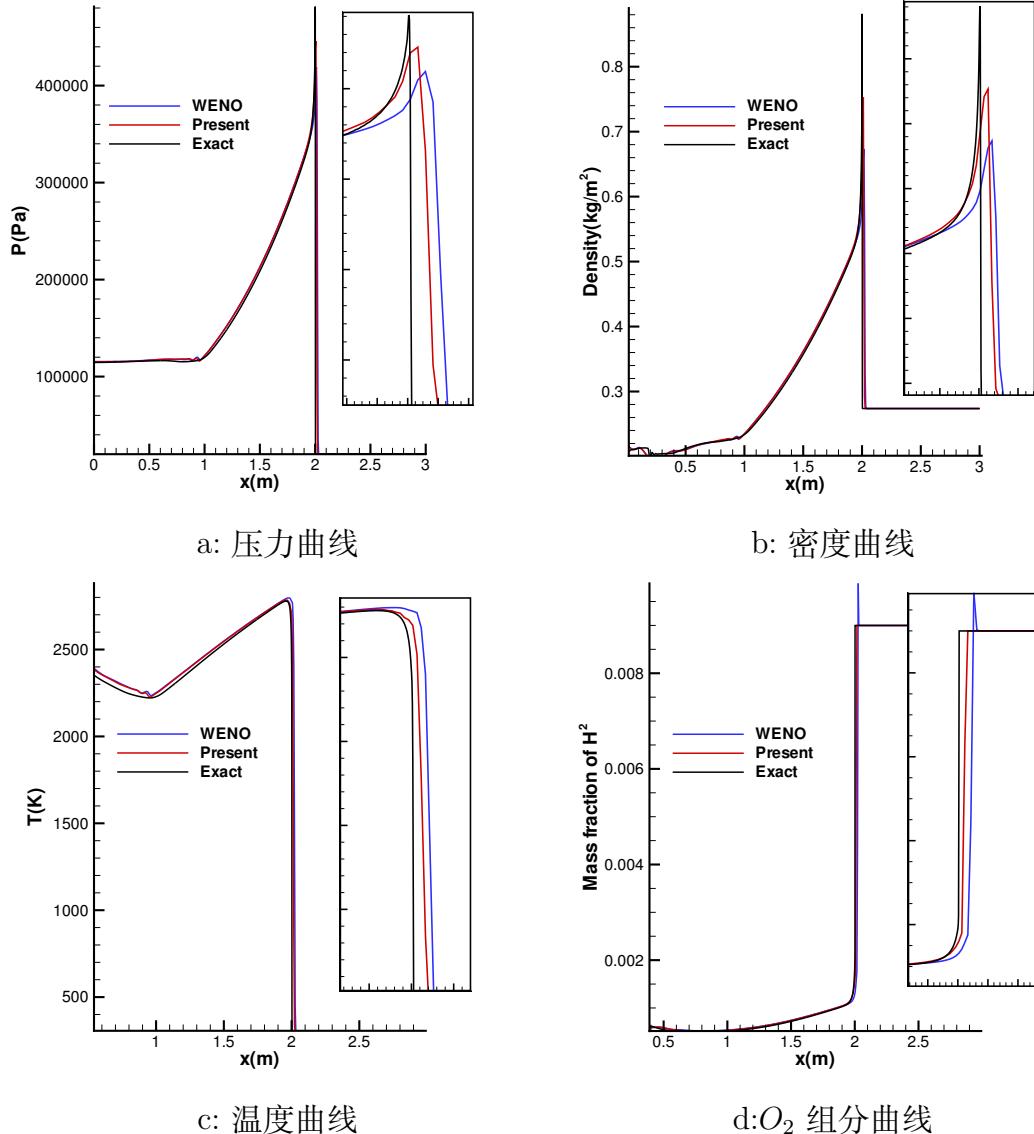
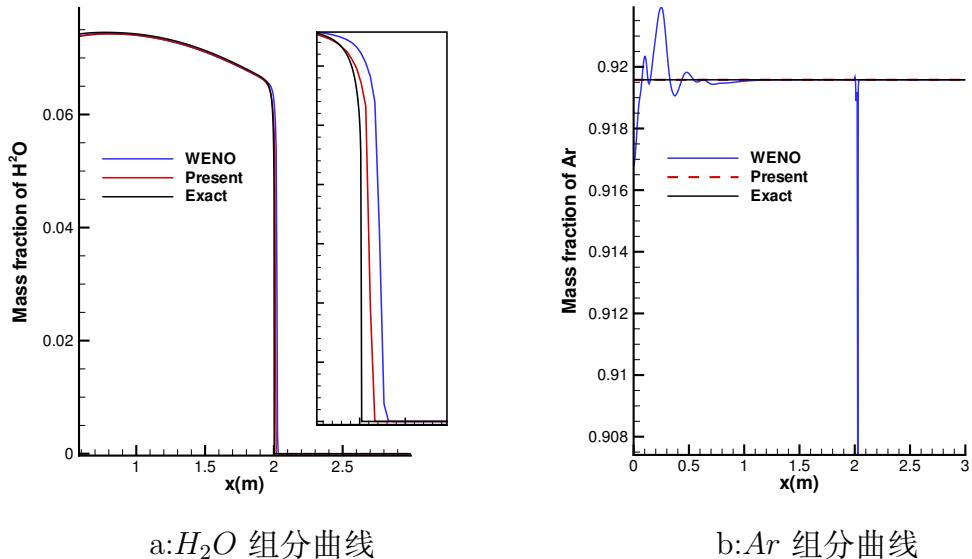
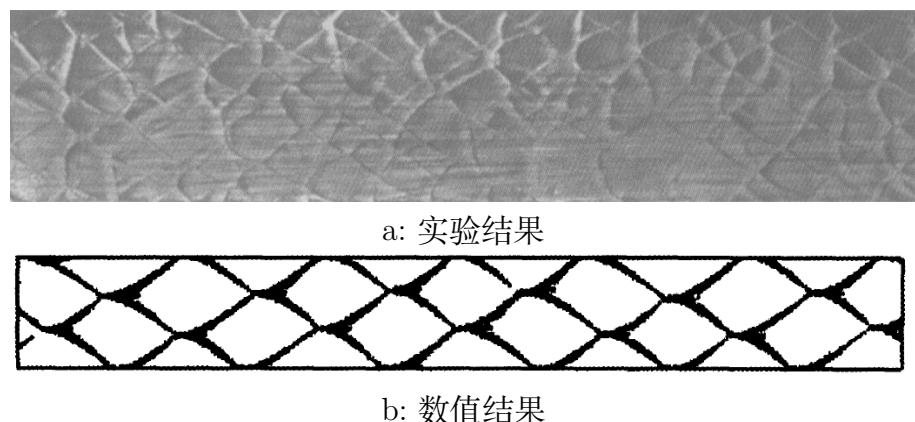
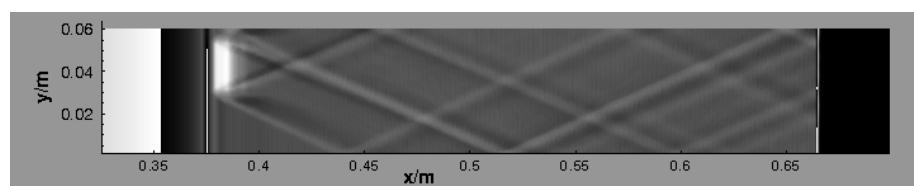


图 8.9: 稀疏网格下不同方法计算结果对比 1, $N = 600$

a: H_2O 组分曲线b: Ar 组分曲线图 8.10: 稀疏网格下不同方法计算结果对比 2, $N = 600$ 图 8.11: $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + \text{Ar}$ 爆轰实验结果和数值结果 [348]图 8.12: $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + \text{Ar}$ 爆轰数值结果

Appendix A 化学反应中相关尺度的探讨

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

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

A.1 化学反应时间尺度分析方程和空间尺度分析方程

除了对尺度概念简单的字面理解，在研究中，每种尺度都应该有更明确的数学定义。为了便于理解全文，下面对空间尺度和时间尺度进行简单的分析和解释，更准确、详细的理论工作请参阅 [111, 232]。

各种尺度的分析都是针对如下形式 ODE 方程展开的。

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

对于化学反应时间尺度分析，采用反应 ODE 方程

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

明显满足方程 (A.1) 的形式，

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

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

其中

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

跨过激波，如果采用随体坐标，流体满足如下形式方程

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

如果假设波前的状态为

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

既可得到爆轰波的 Rankine-Hugoniot 关系

$$\rho u = \rho_0 D \tag{A.4}$$

$$\rho u^2 + p = \rho_0 D^2 + p_0 \tag{A.5}$$

$$E + p = E_0 + p_0 \tag{A.6}$$

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

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

A.2 尺度分析 [232]

我们对方程 (A.2) 进行经典的特征分析, 为了方便我们将方程写为

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

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

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

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

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

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

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

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

该方程的解为

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

第 i 项的当地 $x = x^*$ 特征尺度可以定义为

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

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

Appendix B 二维 DIP 方法伪代码

初始化

```

DO i = 0, Nx
    DO j = 0, Ny
        X(i, j) = 0
        Y(i, j) = 0           ! 单元点初始化
        z(i, j) = z(i, j)
    ENDDO
ENDDO
Npx = Nx,   Npy = Ny           ! 粒子点总数可能变化
DO i = 0, Nx
    DO j = 0, Ny
        ip(i, j) = i
        jp(i, j) = j
        Xp(i, j) = 0          ! 粒子点初始化
        Yp(i, j) = 0
        zp(i, j) = z(i, j)
    ENDDO
ENDDO
DO it = 1, it                  ! 时间循环
    DO i = 0, Nx
        DO j = 0, Ny
            Mrk(i, j) = 0,
            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)
        v(i, j) = (1 - |Y|)v(i, j) + |Y|v(i, j + sy)      ! 插值单元点速度
        Lx = X(i, j) + u(i, j)Δt/Δx                      ! 临时相对坐标变化
        Ly = Y(i, j) + v(i, j)Δt/Δy
        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  $i = 0, N_p x$ 
DO  $j = 0, N_p y$ 
 $s_x = \text{sign}(X_p(i, j)), s_y = \text{sign}(Y_p(i, j))$ 
 $\bar{u}_p(i, j) = (1 - |X_p|)u(ip, jp) + |X_p|u(ip + s_x, J)$           ! 插值粒子点速度
 $\bar{v}_p(i, j) = (1 - |Y_p|)v(ip, jp) + |Y_p|v(ip, jp + s_y)$ 

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

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

```

4. 粒子点修正单元点

```

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

END IF
END DO
END DO

```

5. 在空单元生成单元点

Appendix C 化学反应不同组分热力学拟合参数

对于热完全气体混合物，气体分子的热力学性质随温度的变化而变化，气体的比热、焓和熵都需要通过实验数据拟合得到，本文使用 JANAF 给出的七系数拟合多项式 [273]，其中第 i 组分气体热力学参数具体表达式为：

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

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

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

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

表 C.1: 不同 ODE 格式精度分析

| 组份 | a1 | a2 | a3 | a4 | a5 | a6 | a7 |
|-------------------|----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| H ₂ | | | | | | | |
| 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 ₂ | | | | | | | |
| 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 ₂ | | | | | | | |
| 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 ₂ 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 ₃ | | | | | | | |
| 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 ₄ | | | | | | | |
| 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 ₂ | | | | | | | |
| 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 ₂ 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 ₂ | | | | | | | |
| 200-1000 K | 3.30E+00 | 1.41E-03 | -3.96E-06 | 5.64E-09 | -2.44E-12 | -1.02E+03 | 3.95E+00 |
| 1000-5000 K | 2.93E+00 | 1.49E-03 | -5.68E-07 | 1.01E-10 | -6.75E-15 | -9.23E+02 | 5.98E+00 |

参考文献

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

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

- [19] BALSARA, D. S., AND SPICER, D. S. A staggered mesh algorithm using high order godunov fluxes to ensure solenoidal magnetic fields in magnetohydrodynamic simulations. *Journal of Computational Physics* 149, 2 (1999), 270–292.
- [20] BAO, W., AND JIN, S. The random projection method for hyperbolic conservation laws with stiff reaction terms. *Journal of Computational Physics* 163, 1 (2000), 216–248.
- [21] BAO, W., AND JIN, S. The random projection method for stiff detonation capturing. *SIAM Journal on Scientific Computing* 23, 3 (2001), 1000–1026.
- [22] BAO, W., AND JIN, S. The random projection method for stiff multispecies detonation capturing. *Journal of Computational Physics* 178, 1 (2002), 37–57.
- [23] BATTEN, P., CLARKE, N., LAMBERT, C., AND CAUSON, D. M. On the choice of wavespeeds for the hllc riemann solver. *SIAM Journal on Scientific Computing* 18, 6 (1997), 1553–1570.
- [24] BERGANT, A., SIMPSON, A. R., AND TIJSSELING, A. S. Water hammer with column separation: A historical review. *Journal of fluids and structures* 22, 2 (2006), 135–171.
- [25] BERKENBOSCH, A., KAASSCHIETER, E., AND KLEIN, R. Detonation capturing for stiff combustion chemistry. *Combustion Theory and Modelling* 2, 3 (1998), 313–348.
- [26] BISWAS, R., DEVINE, K. D., AND FLAHERTY, J. E. Parallel, adaptive finite element methods for conservation laws. *Applied Numerical Mathematics* 14, 1-3 (1994), 255–283.
- [27] BOLLINGER, L. E. Experimental detonation velocities and induction distances in hydrogen-air mixtures. *AIAA Journal* 2, 1 (1964), 131–133.

- [28] BONOMETTI, T., AND MAGNAUDET, J. An interface-capturing method for incompressible two-phase flows. validation and application to bubble dynamics. *International Journal of Multiphase Flow* 33, 2 (2007), 109–133.
- [29] BOOK, D. L., BORIS, J. P., AND HAIN, K. Flux-corrected transport ii: Generalizations of the method. *Journal of Computational Physics* 18, 3 (1975), 248–283.
- [30] BORGES, R., CARMONA, M., COSTA, B., AND DON, W. S. An improved weighted essentially non-oscillatory scheme for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics* 227, 6 (2008), 3191–3211.
- [31] BORIS, J. P., AND BOOK, D. Flux-corrected transport. iii. minimal-error fct algorithms. *Journal of Computational Physics* 20, 4 (1976), 397–431.
- [32] BORIS, J. P., AND BOOK, D. L. Flux-corrected transport. i. shasta, a fluid transport algorithm that works. *Journal of computational physics* 11, 1 (1973), 38–69.
- [33] BOURLIOUX, A., MAJDA, A. J., AND ROYTBURD, V. Theoretical and numerical structure for unstable one-dimensional detonations. *SIAM Journal on Applied Mathematics* 51, 2 (1991), 303–343.
- [34] BRACKBILL, J., KOTHE, D. B., AND ZEMACH, C. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of computational physics* 100, 2 (1992), 335–354.
- [35] BRACKBILL, J. U., AND BARNES, D. C. The effect of nonzero ϵ on the numerical solution of the magnetohydrodynamic equations. *Journal of Computational Physics* 35, 3 (1980), 426–430.
- [36] BRACKBILL, J. U., KOTHE, D. B., AND RUPPEL, H. M. Flip: a low-dissipation, particle-in-cell method for fluid flow. *Computer Physics Communications* 48, 1 (1988), 25–38.
- [37] BRENNEN, C. E. *Fundamentals of multiphase flow*. Cambridge university press, 2005.

- [38] BRIO, M., AND WU, C. C. An upwind differencing scheme for the equations of ideal magnetohydrodynamics. *Journal of computational physics* 75, 2 (1988), 400–422.
- [39] BURSTEIN, S. Z., AND MIRIN, A. A. Third order difference methods for hyperbolic equations. *Journal of Computational Physics* 5, 3 (1970), 547–571.
- [40] BUSSING, T., AND PAPPAS, G. An introduction to pulse detonation engines. In *32nd Aerospace Sciences Meeting and Exhibit* (1994), p. 263.
- [41] BUSSING, T., AND PAPPAS, G. Pulse detonation engine theory and concepts. *Developments in high-speed-vehicle propulsion systems(A 97-15029 02-07)*, Reston, VA, American Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc.(*Progress in Astronautics and Aeronautics.* 165 (1996), 421–472.
- [42] BYKOVSKII, F. A., ZHDAN, S. A., AND VEDERNIKOV, E. F. Continuous spin detonations. *Journal of Propulsion and Power* 22, 6 (2006), 1204.
- [43] CALDER, A. C., CURTIS, B. C., DURSI, L., FRYXELL, B., MACNEICE, P., OLSON, K., RICKER, P., ROSNER, R., TIMMES, F., TUFO, H., ET AL. High performance reactive fluid flow simulations using adaptive mesh refinement on thousands of processors. In *Proceedings of the 2000 ACM/IEEE conference on Supercomputing* (2000), IEEE Computer Society, p. 56.
- [44] CHANG, S.-H. *On the application of subcell resolution to conservation laws with stiff source terms.* National Aeronautics and Space Administration, 1989.
- [45] CHANG, S.-H. On the application of eno scheme with subcell resolution to conservation laws with stiff source terms. In *Computational Fluid Dynamics Symposium on Aeropropulsion* (1991), vol. 1, pp. 215–225.

- [46] CHANG, T., CHEN, G.-Q., AND YANG, S. On the 2-d riemann problem for the compressible euler equations. i. interaction of shocks and rarefaction waves. *Discrete and Continuous Dynamical Systems* 1 (1995), 555–584.
- [47] CHANG, T., CHEN, G.-Q., AND YANG, S. On the 2-d riemann problem for the compressible euler equations ii. interaction of contact discontinuities. *Discrete and Continuous Dynamical Systems* 6, 2 (2000), 419–430.
- [48] CHAPMAN, D. L. Vi. on the rate of explosion in gases. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 47, 284 (1899), 90–104.
- [49] CHEN, G. Q. Convergence of the lax-friedrichs scheme for isentropic gas dynamics (iii). *Acta Math. Sci* 6, 1 (1986), 75–120.
- [50] CHEN, S. Stability of a mach configuration. *Communications on pure and applied mathematics* 59, 1 (2006), 1–35.
- [51] CHÉRET, R. *Detonation of condensed explosives*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [52] CHIPMAN, F. A-stable runge-kutta processes. *BIT Numerical Mathematics* 11, 4 (1971), 384–388.
- [53] CHORIN, A. J. Random choice solution of hyperbolic systems. *Journal of Computational Physics* 22, 4 (1976), 517–533.
- [54] CHOU, C.-S., AND SHU, C.-W. High order residual distribution conservative finite difference weno schemes for convection–diffusion steady state problems on non-smooth meshes. *Journal of Computational Physics* 224, 2 (2007), 992–1020.
- [55] COCCHI, J.-P., AND SAUREL, R. A riemann problem based method for the resolution of compressible multimaterial flows. *Journal of Computational Physics* 137, 2 (1997), 265–298.

- [56] COCKBURN, B., AND SHU, C.-W. Tvb runge-kutta local projection discontinuous galerkin finite element method for conservation laws. ii. general framework. *Mathematics of computation* 52, 186 (1989), 411–435.
- [57] COCKBURN, B., AND SHU, C.-W. Nonlinearly stable compact schemes for shock calculations. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 31, 3 (1994), 607–627.
- [58] COLELLA, P. Glimm's method for gas dynamics. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 3, 1 (1982), 76–110.
- [59] COLELLA, P., MAJDA, A., AND ROYTBURD, V. Theoretical and numerical structure for reacting shock waves. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 7, 4 (1986), 1059–1080.
- [60] COLLINS, J. B., AND LEVINE, H. Diffuse interface model of diffusion-limited crystal growth. *Physical Review B* 31, 9 (1985), 6119.
- [61] COSTA, B., AND DON, W. S. Multi-domain hybrid spectral-weno methods for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics* 224, 2 (2007), 970–991.
- [62] COURANT, R., FRIEDRICHS, K., AND LEWY, H. Über die partiellen differenzengleichungen der mathematischen physik. *Mathematische annalen* 100, 1 (1928), 32–74.
- [63] COURANT, R., AND FRIEDRICHS, K. O. *Supersonic flow and shock waves*, vol. 21. Springer Science & Business Media, 1999.
- [64] CRANDALL, M., AND MAJDA, A. The method of fractional steps for conservation laws. *Numerische Mathematik* 34, 3 (1980), 285–314.
- [65] CRANDALL, M. G. The semigroup approach to first order quasilinear equations in several space variables. *Israel Journal of Mathematics* 12, 2 (1972), 108–132.

- [66] DAFERMOS, C. M. Generalized characteristics and the structure of solutions of hyperbolic conservation laws. Tech. rep., DTIC Document, 1976.
- [67] DAHLQUIST, G. G. A special stability problem for linear multistep methods. *BIT Numerical Mathematics* 3, 1 (1963), 27–43.
- [68] DAI, W., AND WOODWARD, P. R. An approximate riemann solver for ideal magnetohydrodynamics. *Journal of Computational Physics* 111, 2 (1994), 354–372.
- [69] DAMEVIN, H.-M., AND HOFFMANN, K. Development of a modified runge-kutta scheme with tvd limiters for ideal three-dimensional magnetogasdynamics. In *32nd AIAA Plasmadynamics and Lasers Conference* (2001), p. 2739.
- [70] DAVIS, S. F. An interface tracking method for hyperbolic systems of conservation laws. *Applied Numerical Mathematics* 10, 6 (1992), 447–472.
- [71] DE SOUSA, F., MANGIAVACCHI, N., NONATO, L., CASTELO, A., TOMÉ, M., FERREIRA, V., CUMINATO, J., AND MCKEE, S. A front-tracking/front-capturing method for the simulation of 3d multi-fluid flows with free surfaces. *Journal of Computational Physics* 198, 2 (2004), 469–499.
- [72] DEITERDING, R., AND BADER, G. High-resolution simulation of detonations with detailed chemistry. In *Analysis and Numerics for Conservation Laws*. Springer, 2005, pp. 69–91.
- [73] DENG, X., AND MAEKAWA, H. Compact high-order accurate nonlinear schemes. *Journal of Computational Physics* 130, 1 (1997), 77–91.
- [74] DING, X. X., CHEN, G. Q., AND LUO, P. Z. Convergence of the lax-friedrichs scheme for isentropic gas-dynamics. 1. *Acta Mathematica Scientia* 5, 4 (1985), 415–432.
- [75] DiPERNA, R. J. Convergence of the viscosity method for isentropic gas dynamics. *Communications in mathematical physics* 91, 1 (1983), 1–30.

- [76] DIRAC, P. The lorentz transformation and absolute time. *Physica* 19, 1–12 (1953), 888–896.
- [77] DONG, L., AND WANG, B. Trajectory-tracking scheme in lagrangian form for solving linear advection problems: preliminary tests. *Monthly Weather Review* 140, 2 (2012), 650–663.
- [78] DÖRING, W. On detonation processes in gases. *Ann. Phys* 43, 421-436 (1943), 9.
- [79] DREMIN, A. N., SAVROV, S., TROFIMOV, V. S., AND SHVEDOV, K. Detonation waves in condensed media. Tech. rep., DTIC Document, 1972.
- [80] DU, Q., LIU, C., AND WANG, X. Retrieving topological information for phase field models. *SIAM Journal on Applied Mathematics* 65, 6 (2005), 1913–1932.
- [81] EBERHARDT, S., AND IMLAY, S. Diagonal implicit scheme for computing flows with finite rate chemistry. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer* 6, 2 (1992), 208–216.
- [82] ECKETT, C. A. *Numerical and analytical studies of the dynamics of gaseous detonations*. PhD thesis, Citeseer, 2000.
- [83] EDWARDS, D., WALKER, J., AND NETTLETON, M. On the propagation of detonation waves along wedges. *Archivum Combustionis* 4 (1984), 197–209.
- [84] EDWARDS, J. R. A low-diffusion flux-splitting scheme for navier-stokes calculations. *Computers & Fluids* 26, 6 (1997), 635–659.
- [85] ELLING, V., AND LIU, T.-P. Supersonic flow onto a solid wedge. *Communications on Pure and Applied Mathematics* 61, 10 (2008), 1347–1448.
- [86] ELLIOTT, C. M., AND SONGMU, Z. On the cahn-hilliard equation. *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 96, 4 (1986), 339–357.

- [87] ENGQUIST, B., AND SJÖGREEN, B. *Robust difference approximations of stiff inviscid detonation waves*. Department of Mathematics, University of California, Los Angeles, 1991.
- [88] ENRIGHT, D., FEDKIW, R., FERZIGER, J., AND MITCHELL, I. A hybrid particle level set method for improved interface capturing. *Journal of Computational physics* 183, 1 (2002), 83–116.
- [89] ENRIGHT, D., LOSASSO, F., AND FEDKIW, R. A fast and accurate semi-lagrangian particle level set method. *Computers & structures* 83, 6 (2005), 479–490.
- [90] EVANS, M. W., HARLOW, F. H., AND BROMBERG, E. The particle-in-cell method for hydrodynamic calculations. Tech. rep., DTIC Document, 1957.
- [91] FAN, Y., DURLOFSKY, L. J., AND TCHELEPI, H. A. A fully-coupled flow-reactive-transport formulation based on element conservation, with application to co 2 storage simulations. *Advances in Water Resources* 42 (2012), 47–61.
- [92] FAY, J. A. Two-dimensional gaseous detonations: Velocity deficit. *The Physics of Fluids* 2, 3 (1959), 283–289.
- [93] FEDKIW, R. P., ASLAM, T., MERRIMAN, B., AND OSHER, S. A non-oscillatory eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the ghost fluid method). *Journal of computational physics* 152, 2 (1999), 457–492.
- [94] FEYNMAN, R., AND VERNON JR., F. The theory of a general quantum system interacting with a linear dissipative system. *Annals of Physics* 24 (1963), 118–173.
- [95] FICKETT, W., AND DAVIS, W. C. *Detonation: theory and experiment*. Courier Corporation, 2012.
- [96] FREIDBERG, J. P. Ideal magnetohydrodynamics.

- [97] GAITONDE, D. V. Development of a solver for 3-d non-ideal magnetogasdynamics. *AIAA paper 99* (1999), 3610.
- [98] GAO, Z. Numerical perturbation algorithm and its cfd schemes. *Advances in Mechanics 40* (2010), 607–633.
- [99] GELFAND, I. Some problems in the theory of quasilinear equations. *Amer. Math. Soc. Transl. 29*, 2 (1963), 295–381.
- [100] GEROLYMONS, G., SÉNÉCHAL, D., AND VALLET, I. Very-high-order weno schemes. *Journal of Computational Physics 228*, 23 (2009), 8481–8524.
- [101] GHOSH, D., AND BAEDER, J. D. Weighted non-linear compact schemes for the direct numerical simulation of compressible, turbulent flows. *Journal of Scientific Computing 61*, 1 (2014), 61–89.
- [102] GLAISTER, P. An approximate linearised riemann solver for the euler equations for real gases. *Journal of Computational Physics 74*, 2 (1988), 382–408.
- [103] GLASSMAN, I., YETTER, R. A., AND GLUMAC, N. G. *Combustion*. Academic press, 2014.
- [104] GLIMM, J. Solutions in the large for nonlinear hyperbolic systems of equations. *Communications on Pure and Applied Mathematics 18*, 4 (1965), 697–715.
- [105] GLIMM, J., GROVE, J. W., LI, X., AND ZHAO, N. Simple front tracking. *Contemporary Mathematics 238*, 2 (1999), 133–149.
- [106] GLIMM, J., AND LAX, P. D. Decay of solutions of systems of nonlinear hyperbolic conservation laws.
- [107] GODUNOV, S. K. A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics. *Matematicheskii Sbornik 89*, 3 (1959), 271–306.

- [108] GOMES, J., AND FAUGERAS, O. Reconciling distance functions and level sets. In *Biomedical Imaging, 2002. 5th IEEE EMBS International Summer School on* (2002), IEEE, pp. 15–pp.
- [109] GOODMAN, J., AND XIN, Z. Viscous limits for piecewise smooth solutions to systems of conservation laws. *Archive for rational mechanics and analysis* 121, 3 (1992), 235–265.
- [110] GOODMAN, J. B., AND LEVEQUE, R. J. On the accuracy of stable schemes for 2d scalar conservation laws. *Mathematics of computation* (1985), 15–21.
- [111] G.STRANG. *Linear Algebra and its Applications*, 3rd ed. Fort Worth, TX: Harcourt Brace Jovanovich, 1988.
- [112] GUIRAO, C., KNYSTAUTAS, R., AND LEE, J. *A summary of hydrogen-air detonation experiments*. Division of Systems Research, Office of Nuclear Regulatory Research, US Nuclear Regulatory Commission, 1989.
- [113] GUO, C., WANG, C., XU, S., AND ZHANG, H. Cellular pattern evolution in gaseous detonation diffraction in a 90-branched channel. *Combustion and flame* 148, 3 (2007), 89–99.
- [114] GURSKI, K. F. An hllc-type approximate riemann solver for ideal magnetohydrodynamics. *SIAM Journal on Scientific Computing* 25, 6 (2004), 2165–2187.
- [115] HADJADJ, A., PERROT, Y., AND VERMA, S. Numerical study of shock/boundary layer interaction in supersonic overexpanded nozzles. *Aerospace Science and Technology* 42 (2015), 158–168.
- [116] HAIER, E., NORSETT, S., AND WANNER, G. Solving ordinary differential equations i, nonstiff problems. *Section III* 8 (1987).
- [117] HAIRER, E., AND WANNER, G. Stiff differential equations solved by radau methods. *Journal of Computational and Applied Mathematics* 111, 1 (1999), 93–111.

- [118] HAMMER, P. C., AND HOLLINGSWORTH, J. W. Trapezoidal methods of approximating solutions of differential equations. *Mathematical Tables and Other Aids to Computation* (1955), 92–96.
- [119] HAMMITT, F. G. *Cavitation and multiphases flow phenomena*. McGraw-Hill, 1980.
- [120] HAN, S.-H., LEE, J.-I., AND KIM, K. H. Accurate and robust pressure weight advection upstream splitting method for magnetohydrodynamics equations. *AIAA journal* 47, 4 (2009), 970.
- [121] HÄNEL, D., SCHWANE, R., AND SEIDER, G. On the accuracy of upwind schemes for the solution of the navier-stokes equations. *AIAA paper 1105* (1987), 1987.
- [122] HARLOW, F. H. Hydrodynamic problems involving large fluid distortions. *Journal of the ACM (JACM)* 4, 2 (1957), 137–142.
- [123] HARLOW, F. H., WELCH, J. E., ET AL. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Physics of fluids* 8, 12 (1965), 2182.
- [124] HARLOW F, W. J. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with a free surface. *Phys Fluids* 8, 218 (1965), 2–9.
- [125] HARTEN, A. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of computational physics* 49, 3 (1983), 357–393.
- [126] HARTEN, A. Eno schemes with subcell resolution.[essentially nonoscillatory].
- [127] HARTEN, A., ENGQUIST, B., OSHER, S., AND CHAKRAVARTHY, S. R. Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes, iii. *Journal of computational physics* 71, 2 (1987), 231–303.

- [128] HARTEN, A., LAX, P. D., AND VAN LEER, B. On upstream differencing and godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. *SIAM Review* 25, 1 (1983), 35.
- [129] HARTEN, A., LAX, P. D., AND VAN LEER, B. On upstream differencing and godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. In *Upwind and High-Resolution Schemes*. Springer, 1997, pp. 53–79.
- [130] HARTEN, A., OSHER, S., ENGQUIST, B., AND CHAKRAVARTHY, S. R. Some results on uniformly high-order accurate essentially nonoscillatory schemes. *Applied Numerical Mathematics* 2, 3-5 (1986), 347–377.
- [131] HELZEL, C., LEVEQUE, R. J., AND WARNECKE, G. A modified fractional step method for the accurate approximation of detonation waves. *SIAM Journal on Scientific Computing* 22, 4 (2000), 1489–1510.
- [132] HENRICK, A. K., ASLAM, T. D., AND POWERS, J. M. Mapped weighted essentially non-oscillatory schemes: achieving optimal order near critical points. *Journal of Computational Physics* 207, 2 (2005), 542–567.
- [133] HILDEBRAND, N., DWIVEDI, A., SHRESTHA, P., NICHOLS, J. W., JOVANOVIC, M. R., AND CANDLER, G. V. Global stability analysis of oblique shock/boundary layer interactions at mach 5.92. In *APS Division of Fluid Dynamics Meeting Abstracts* (2016).
- [134] HILL, D. J., AND PULLIN, D. I. Hybrid tuned center-difference-weno method for large eddy simulations in the presence of strong shocks. *Journal of Computational Physics* 194, 2 (2004), 435–450.
- [135] HIRT, C. W., AND NICHOLS, B. D. Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of computational physics* 39, 1 (1981), 201–225.
- [136] HONKKILA, V., AND JANHUNEN, P. Hllc solver for ideal relativistic mhd. *Journal of Computational Physics* 223, 2 (2007), 643–656.

- [137] HOPF, E. The partial differential equation $ut + uux = \mu xx$. *Communications on Pure and Applied mathematics* 3, 3 (1950), 201–230.
- [138] HU, X., ADAMS, N., AND IACCARINO, G. On the hllc riemann solver for interface interaction in compressible multi-fluid flow. *Journal of Computational Physics* 228, 17 (2009), 6572–6589.
- [139] HU, X., KHOO, B., ADAMS, N. A., AND HUANG, F. A conservative interface method for compressible flows. *Journal of Computational Physics* 219, 2 (2006), 553–578.
- [140] HU, X. Y., AND KHOO, B. C. An interface interaction method for compressible multifluids. *Journal of Computational Physics* 198, 1 (2004), 35–64.
- [141] HU, X.-Y., ZHANG, D.-L., AND JIANG, Z.-L. Numerical simulation of gaseous detonation with detailed chemical reaction model. *Acta Aerodynamica Sinica* 21, 1 (2003), 59–66.
- [142] HUANG, F., AND WANG, Z. Convergence of viscosity solutions for isothermal gas dynamics. *SIAM journal on mathematical analysis* 34, 3 (2002), 595–610.
- [143] HUANG, J., AND WEBB, W. Diffuse interface in a critical fluid mixture. *The Journal of Chemical Physics* 50, 9 (1969), 3677–3693.
- [144] HWANG, P., FEDKIW, R., MERRIMAN, B., ASLAM, T., KARAGOZIAN, A., AND OSHER, S. Numerical resolution of pulsating detonation waves. *DCJ* 2 (2000), 1.
- [145] JACQMIN, D. Calculation of two-phase navier–stokes flows using phase-field modeling. *Journal of Computational Physics* 155, 1 (1999), 96–127.
- [146] JAMET, D., LEBAIGUE, O., COUTRIS, N., AND DELHAYE, J. The second gradient method for the direct numerical simulation of liquid–vapor flows with phase change. *Journal of Computational Physics* 169, 2 (2001), 624–651.

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

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

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

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

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

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

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

- [215] OLEINIK, O. A. On the uniqueness of the generalized solution of the cauchy problem for a non-linear system of equations occurring in mechanics. *Uspekhi Matematicheskikh Nauk* 12, 6 (1957), 169–176.
- [216] OLEINIK, O. A. Uniqueness and stability of the generalized solution of the cauchy problem for a quasi-linear equation. *Uspekhi Matematicheskikh Nauk* 14, 2 (1959), 165–170.
- [217] ORAN, E. S., WEBER, J. W., STEFANIW, E. I., LEFEBVRE, M. H., AND ANDERSON, J. D. A numerical study of a two-dimensional h 2-o 2-ar detonation using a detailed chemical reaction model. *Combustion and Flame* 113, 1 (1998), 147–163.
- [218] OSHER, S. Shock modelling in transonic and supersonic flow.
- [219] OSHER, S., AND FEDKIW, R. *Level set methods and dynamic implicit surfaces*, vol. 153. Springer Science & Business Media, 2006.
- [220] OSHER, S., AND SETHIAN, J. A. Fronts propagating with curvature-dependent speed: algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of computational physics* 79, 1 (1988), 12–49.
- [221] OSHER, S., AND SOLOMON, F. Upwind difference schemes for hyperbolic systems of conservation laws. *Mathematics of computation* 38, 158 (1982), 339–374.
- [222] PANG, Y., CAI, S., AND ZHAO, Y. Global solutions to the two-dimensional riemann problem for a system of conservation laws. *Journal of Mathematical Physics* 57, 6 (2016), 061501.
- [223] P.D.LAX. Shock waves and entropy, in contributions to nonlinear functional analysis (e. a. zarantonello, ed.). *Academic Press, New York* (1971), 603–634.
- [224] P.D.LAX, B. W. Hyperbolic systems of conservation laws ii. *Comm. Pure Appl. Math.* 13 (1960), 537–566.

- [225] PENG, J., AND SHEN, Y. Improvement of weighted compact scheme with multi-step strategy for supersonic compressible flow. *Computers & Fluids* 115 (2015), 243–255.
- [226] PILLIOD, J. E., AND PUCKETT, E. G. Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces. *Journal of Computational Physics* 199, 2 (2004), 465–502.
- [227] PIROZZOLI, S. Conservative hybrid compact-weno schemes for shock-turbulence interaction. *Journal of Computational Physics* 178, 1 (2002), 81–117.
- [228] PIROZZOLI, S. Numerical methods for high-speed flows. *Annual review of fluid mechanics* 43 (2011), 163–194.
- [229] POINSOT, T., ECHEKKI, T., AND MUNGAL, M. A study of the laminar flame tip and implications for premixed turbulent combustion. *Combustion science and technology* 81, 1-3 (1992), 45–73.
- [230] POPINET, S., AND ZALESKI, S. A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 30, 6 (1999), 775–793.
- [231] POWELL, K. G., ROE, P. L., LINDE, T. J., GOMBOSI, T. I., AND DE ZEEUW, D. L. A solution-adaptive upwind scheme for ideal magnetohydrodynamics. *Journal of Computational Physics* 154, 2 (1999), 284–309.
- [232] POWERS, J. M., AND PAOLUCCI, S. Accurate spatial resolution estimates for reactive supersonic flow with detailed chemistry. *AIAA journal* 43, 5 (2005), 1088–1099.
- [233] QIU, J., AND SHU, C.-W. A comparison of troubled-cell indicators for runge–kutta discontinuous galerkin methods using weighted essentially nonoscillatory limiters. *SIAM Journal on Scientific Computing* 27, 3 (2005), 995–1013.

- [234] REN, Y.-X., ZHANG, H., ET AL. A characteristic-wise hybrid compact-weno scheme for solving hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics* 192, 2 (2003), 365–386.
- [235] RICHARDSON, L. F. *Weather prediction by numerical process*. Cambridge University Press, 2007.
- [236] RIDER, W. J., AND KOTHE, D. B. Reconstructing volume tracking. *Journal of computational physics* 141, 2 (1998), 112–152.
- [237] RIEMANN, B. *Über die Fortpflanzung ebener Luftwellen von endlicher Schwingungsweite*. Verlag der Dieterichschen Buchhandlung, 1860.
- [238] ROE, P. L. Approximate riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes. *Journal of computational physics* 43, 2 (1981), 357–372.
- [239] ROE, P. L., AND BALSARA, D. S. Notes on the eigensystem of magnetohydrodynamics. *SIAM Journal on Applied Mathematics* 56, 1 (1996), 57–67.
- [240] ROY, G., FROLOV, S., BORISOV, A., AND NETZER, D. Pulse detonation propulsion: challenges, current status, and future perspective. *Progress in Energy and Combustion Science* 30, 6 (2004), 545–672.
- [241] RUBIN, E. L., AND BURSTEIN, S. Z. Difference methods for the inviscid and viscous equations of a compressible gas. *Journal of Computational Physics* 2, 2 (1967), 178–196.
- [242] RUPERT, V. Shock-interface interaction: current research on the richtmyer-meshkov problem. In *Shock Waves*. Springer, 1992, pp. 83–94.
- [243] RUSANOV, V. On difference schemes of third order accuracy for nonlinear hyperbolic systems. *Journal of Computational Physics* 5, 3 (1970), 507–516.
- [244] SCARDOVELLI, R., AND ZALESKI, S. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annual review of fluid mechanics* 31, 1 (1999), 567–603.

- [245] SCHECTER, S., AND SHEARER, M. Undercompressive shocks for non-strictly hyperbolic conservation laws. *Journal of Dynamics and Differential Equations* 3, 2 (1991), 199–271.
- [246] SCHULTZ, E., AND SHEPHERD, J. Validation of detailed reaction mechanisms for detonation simulation.
- [247] SCHULZ-RINNE, C. W. Classification of the riemann problem for two-dimensional gas dynamics. *SIAM journal on mathematical analysis* 24, 1 (1993), 76–88.
- [248] SETHIAN, J. A. *Level set methods and fast marching methods: evolving interfaces in computational geometry, fluid mechanics, computer vision, and materials science*, vol. 3. Cambridge university press, 1999.
- [249] SHAMPINE, L. F. *Numerical solution of ordinary differential equations*, vol. 4. CRC Press, 1994.
- [250] SHANG, J. Recent research in magneto-aerodynamics. *Progress in Aerospace Sciences* 37, 1 (2001), 1–20.
- [251] SHEN, Y., LIU, L., AND YANG, Y. Multistep weighted essentially non-oscillatory scheme. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 75, 4 (2014), 231–249.
- [252] SHEN, Y., YANG, G., AND GAO, Z. High-resolution finite compact difference schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics* 216, 1 (2006), 114–137.
- [253] SHEN, Y., AND ZHA, G. Application of low diffusion e-cusp scheme with high order weno scheme for chemical reacting flows. In *40th Fluid Dynamics Conference and Exhibit* (2010), p. 4995.
- [254] SHEN, Y., AND ZHA, G. Generalized finite compact difference scheme for shock/complex flowfield interaction. *Journal of Computational Physics* 230, 12 (2011), 4419–4436.

- [255] SHEN, Y., AND ZHA, G. Improvement of weighted essentially non-oscillatory schemes near discontinuities. *Computers & Fluids* 96 (2014), 1–9.
- [256] SHEN, Y., ZHA, G., AND HUERTA, M. A. E-cusp scheme for the equations of ideal magnetohydrodynamics with high order weno scheme. *Journal of Computational Physics* 231, 19 (2012), 6233–6247.
- [257] SHEN, Y.-Q., WANG, R.-Q., AND LIAO, H.-Z. A fifth-order accurate weighted ennn difference scheme and its applications. *Journal of Computational Mathematics* (2001), 531–538.
- [258] SHENG, W. Two-dimensional riemann problem for scalar conservation laws. *Journal of Differential Equations* 183, 1 (2002), 239–261.
- [259] SHEPHERD, J. Detonation in gases. *Proceedings of the Combustion Institute* 32, 1 (2009), 83–98.
- [260] SHIN, S., AND JURIC, D. Modeling three-dimensional multiphase flow using a level contour reconstruction method for front tracking without connectivity. *Journal of Computational Physics* 180, 2 (2002), 427–470.
- [261] SHIPILOVA, O., HAARIO, H., AND SMOLIAŃSKI, A. Particle transport method for convection problems with reaction and diffusion. *International journal for numerical methods in fluids* 54, 10 (2007), 1215–1238.
- [262] SHU, C.-W. Total-variation-diminishing time discretizations. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 9, 6 (1988), 1073–1084.
- [263] SHU, C.-W., AND OSHER, S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. *Journal of Computational Physics* 77, 2 (1988), 439–471.
- [264] SHU, C.-W., AND OSHER, S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes, ii. *Journal of Computational Physics* 83, 1 (1989), 32–78.

- [265] SHYUE, K.-M. An efficient shock-capturing algorithm for compressible multicomponent problems. *Journal of Computational Physics* 142, 1 (1998), 208–242.
- [266] SMOLIANSKI, A., SHIPOLOVA, O., AND HAARIO, H. A fast high-resolution algorithm for linear convection problems: particle transport method. *International journal for numerical methods in engineering* 70, 6 (2007), 655–684.
- [267] SMOLLER, J. *Shock waves and reaction-diffusion equations*, vol. 258. Springer Science & Business Media, 2012.
- [268] SMOKE, M., PURI, I., AND SESHADRI, K. A comparison between numerical calculations and experimental measurements of the structure of a counterflow diffusion flame burning diluted methane in diluted air. In *Symposium (International) on Combustion* (1988), vol. 21, Elsevier, pp. 1783–1792.
- [269] SOLOUKHIN, R. Multiheaded structure of gaseous detonation. *Combustion and Flame* 10, 1 (1966), 51–58.
- [270] SOO KIM, M., SUN PARK, J., AND LEE, W. I. A new vof-based numerical scheme for the simulation of fluid flow with free surface. part ii: application to the cavity filling and sloshing problems. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 42, 7 (2003), 791–812.
- [271] STEGER, J. L., AND WARMING, R. Flux vector splitting of the inviscid gasdynamic equations with application to finite-difference methods. *Journal of computational physics* 40, 2 (1981), 263–293.
- [272] STRANG, G. On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 5, 3 (1968), 506–517.
- [273] STULL, D. R., AND PROPHET, H. Janaf thermochemical tables. Tech. rep., National Standard Reference Data System, 1971.

- [274] SUSSMAN, M. A second order coupled level set and volume-of-fluid method for computing growth and collapse of vapor bubbles. *Journal of Computational Physics* 187, 1 (2003), 110–136.
- [275] SUSSMAN, M., AND PUCKETT, E. G. A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3d and axisymmetric incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics* 162, 2 (2000), 301–337.
- [276] SUSSMAN, M., SMEREKA, P., AND OSHER, S. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *Journal of Computational physics* 114, 1 (1994), 146–159.
- [277] TAN, D. C., AND ZHANG, T. Two-dimensional riemann problem for a hyperbolic system of nonlinear conservation laws: I. four-j cases. *Journal of differential equations* 111, 2 (1994), 203–254.
- [278] TARTAR, L. Compensated compactness and applications to partial differential equations. In *Nonlinear analysis and mechanics: Heriot-Watt symposium* (1979), vol. 4, pp. 136–212.
- [279] TARTAR, L. The compensated compactness method applied to systems of conservation laws. In *Systems of nonlinear partial differential equations*. Springer, 1983, pp. 263–285.
- [280] TOMÉ, M., CUMINATO, J., MANGIAVACCHI, N., MCKEE, S., ET AL. Gensmac3d: a numerical method for solving unsteady three-dimensional free surface flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 37, 7 (2001), 747–796.
- [281] TOME, M. F., AND MCKEE, S. Gensmac: A computational marker and cell method for free surface flows in general domains. *Journal of Computational Physics* 110, 1 (1994), 171–186.
- [282] TORO, E. F., SPRUCE, M., AND SPEARES, W. Restoration of the contact surface in the hll-riemann solver. *Shock waves* 4, 1 (1994), 25–34.

- [283] TORRES, D., AND BRACKBILL, J. The point-set method: front-tracking without connectivity. *Journal of Computational Physics* 165, 2 (2000), 620–644.
- [284] TOSATTO, L., AND VIGEVANO, L. Numerical solution of under-resolved detonations. *Journal of Computational Physics* 227, 4 (2008), 2317–2343.
- [285] TÓTH, G. The $\cdot \cdot b = 0$ constraint in shock-capturing magnetohydrodynamics codes. *Journal of Computational Physics* 161, 2 (2000), 605–652.
- [286] TROTSYUK, A. Numerical simulation of the structure of two-dimensional gaseous detonation of an h2-o2-ar mixture. *Combustion, Explosion and Shock Waves* 35, 5 (1999), 549–558.
- [287] TRYGGVASON, G., BUNNER, B., ESMAEELI, A., JURIC, D., ALRAWAHI, N., TAUBER, W., HAN, J., NAS, S., AND JAN, Y.-J. A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *Journal of Computational Physics* 169, 2 (2001), 708–759.
- [288] TUMUKLU, O., LEVIN, D. A., AND AUSTIN, J. M. Shock-shock interactions for a double wedge configuration in different gases. In *53rd AIAA Aerospace Sciences Meeting* (2015), p. 1520.
- [289] UNVERDI, S. O., AND TRYGGVASON, G. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of computational physics* 100, 1 (1992), 25–37.
- [290] VAN LEER, B. Towards the ultimate conservative difference scheme i. the quest of monotonicity. 163–168.
- [291] VAN LEER, B. Towards the ultimate conservative difference scheme. ii. monotonicity and conservation combined in a second-order scheme. *Journal of computational physics* 14, 4 (1974), 361–370.
- [292] VAN LEER, B. Towards the ultimate conservative difference scheme iii. upstream-centered finite-difference schemes for ideal compressible flow. *Journal of Computational Physics* 23, 3 (1977), 263–275.

- [293] VAN LEER, B. Towards the ultimate conservative difference scheme. iv. a new approach to numerical convection. *Journal of computational physics* 23, 3 (1977), 276–299.
- [294] VAN LEER, B. Towards the ultimate conservative difference scheme. v. a second-order sequel to godunov’s method. *Journal of computational Physics* 32, 1 (1979), 101–136.
- [295] VAN LEER, B. Flux-vector splitting for the euler equations. In *IN: International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics, 8th, Aachen, West Germany, June 28-July 2, 1982, Proceedings (A84-35301 16-34)*. Berlin, Springer-Verlag, 1982, p. 507-512. (1982), pp. 507–512.
- [296] VON NEUMAN, J. Theory of detonation waves. Tech. rep., DTIC Document, 1942.
- [297] WADA, Y., AND LIOU, M. An accurate and robust splitting scheme for shock and contact discontinuities, aiaa, 1994.
- [298] WANG, C., LIU, T., AND KHOO, B. A real ghost fluid method for the simulation of multimedium compressible flow. *SIAM Journal on Scientific Computing* 28, 1 (2006), 278–302.
- [299] WANG, C., XU, S., AND GUO, C. Gaseous detonation propagation in a bifurcated tube. *Journal of Fluid Mechanics* 599 (2008), 81–110.
- [300] WANG, C., ZHANG, D.-L., AND JIANG, Z.-L. Numerical investigation of detonation sweeping on an interface of inert gas and its decoupling. *Explosion and Shock Waves* 26, 6 (2006), 556.
- [301] WANG, W., SHU, C.-W., YEE, H., KOTOV, D. V., AND SJÖGREEN, B. High order finite difference methods with subcell resolution for stiff multispecies discontinuity capturing. *Communications in Computational Physics* 17, 02 (2015), 317–336.

- [302] WANG, W., SHU, C.-W., YEE, H., AND SJÖGREEN, B. High order finite difference methods with subcell resolution for advection equations with stiff source terms. *Journal of Computational Physics* 231, 1 (2012), 190–214.
- [303] WANG, X., AND DU, Q. Modelling and simulations of multi-component lipid membranes and open membranes via diffuse interface approaches. *Journal of mathematical biology* 56, 3 (2008), 347–371.
- [304] WANG, Z. J., AND CHEN, R. Optimized weighted essentially nonoscillatory schemes for linear waves with discontinuity. *Journal of Computational Physics* 174, 1 (2001), 381–404.
- [305] WANNER, G., AND HAIRER, E. Solving ordinary differential equations ii. *Stiff and Differential-Algebraic Problems* (1991).
- [306] WELCH, J. E., HARLOW, F. H., SHANNON, J. P., AND DALY, B. J. The mac method-a computing technique for solving viscous, incompressible, transient fluid-flow problems involving free surfaces. Tech. rep., Los Alamos Scientific Lab., Univ. of California, N. Mex., 1965.
- [307] WOODWARD, P., AND COLELLA, P. The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks. *Journal of computational physics* 54, 1 (1984), 115–173.
- [308] XIANG, G., WANG, C., TENG, H., AND JIANG, Z. Investigations of three-dimensional shock/shock interactions over symmetrical intersecting wedges. *AIAA Journal* 54, 1 (2016), 1472–1481.
- [309] XU, Z., AND SHU, C.-W. Anti-diffusive flux corrections for high order finite difference weno schemes. *Journal of Computational Physics* 205, 2 (2005), 458–485.
- [310] YANG, G., YAO, Y., FANG, J., GAN, T., AND LU, L. Large-eddy simulation of shock-wave/turbulent boundary layer interaction and its control using sparkjet. In *International Journal of Modern Physics: Conference Series* (2016), vol. 42, World Scientific, p. 1660186.

- [311] YEE, H., KOTOV, D. V., WANG, W., AND SHU, C.-W. Spurious behavior of shock-capturing methods by the fractional step approach: Problems containing stiff source terms and discontinuities. *Journal of Computational Physics* 241 (2013), 266–291.
- [312] YEE, H., AND SJÖGREEN, B. Development of low dissipative high order filter schemes for multiscale navier–stokes/mhd systems. *Journal of Computational Physics* 225, 1 (2007), 910–934.
- [313] YEE, H., AND SJÖGREEN, B. High order filter methods for wide range of compressible flow speeds. In *Spectral and High Order Methods for Partial Differential Equations*. Springer, 2011, pp. 327–337.
- [314] YOON, H., PARK, I., LEE, Y., AND JEONG, J. An unstructured smac algorithm for thermal non-equilibrium two-phase flows. *International Communications in Heat and Mass Transfer* 36, 1 (2009), 16–24.
- [315] YOUNG, F. R. *Cavitation*. World Scientific, 1999.
- [316] YOUNGS, D. L. Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion. *Numerical methods for fluid dynamics* 24, 2 (1982), 273–285.
- [317] YU, C., GAO, Z., AND SHEU, T. W. Development of a symplectic and phase error reducing perturbation finite-difference advection scheme. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals* 70, 2 (2016), 136–151.
- [318] YU, S.-H. Zero-dissipation limit of solutions with shocks for systems of hyperbolic conservation laws. *Archive for rational mechanics and analysis* 146, 4 (1999), 275–370.
- [319] YUE, P., ZHOU, C., AND FENG, J. J. Sharp-interface limit of the cahn–hilliard model for moving contact lines. *Journal of Fluid Mechanics* 645 (2010), 279–294.
- [320] ZALESAK, S. T. Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids. *Journal of computational physics* 31, 3 (1979), 335–362.

- [321] ZELDOVICH, J. To the theory of detonation propagation in gas systems. *Journal of experimental and theoretical physics* 10, 5 (1940), 542–568.
- [322] ZHA, G. Comparative study of upwind scheme performance for entropy condition and discontinuities, aiaa, 1999. Tech. rep., Paper 99-CP-3348, June 28-July 1.
- [323] ZHA, G., SHEN, Y., AND WANG, B. Calculation of transonic flows using weno method with a low diffusion e-cusp upwind scheme. In *46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit* (2008), p. 745.
- [324] ZHA, G.-C. Numerical tests of upwind scheme performance for entropy condition. *AIAA journal* 37, 8 (1999), 1005–1007.
- [325] ZHA, G.-C. A low diffusion e-cusp upwind scheme for transonic flows. In *34th AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit* (2004), p. 2707.
- [326] ZHA, G.-C. Low diffusion efficient upwind scheme. *AIAA journal* 43, 5 (2005), 1137–1140.
- [327] ZHA, G.-C., AND BILGEN, E. Numerical solutions of euler equations by using a new flux vector splitting scheme. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 17, 2 (1993), 115–144.
- [328] ZHA, G.-C., AND HU, Z. Calculation of transonic internal flows using an efficient high-resolution upwind scheme. *AIAA journal* 42, 2 (2004), 205–214.
- [329] ZHA, G.-C., SHEN, Y., AND WANG, B. An improved low diffusion e-cusp upwind scheme. *Computers & Fluids* 48, 1 (2011), 214–220.
- [330] ZHANG, B., LIU, H., CHEN, F., AND WANG, J. H. The equilibrium state method for hyperbolic conservation laws with stiff reaction terms. *Journal of Computational Physics* 263 (2014), 151–176.

- [331] ZHANG, S., JIANG, S., AND SHU, C.-W. Development of nonlinear weighted compact schemes with increasingly higher order accuracy. *Journal of Computational Physics* 227, 15 (2008), 7294–7321.
- [332] ZHANG, T., AND ZHENG, Y. X. Conjecture on the structure of solutions of the riemann problem for two-dimensional gas dynamics systems. *SIAM Journal on Mathematical Analysis* 21, 3 (1990), 593–630.
- [333] ZHELTOVODOV, A. Shock waves/turbulent boundary-layer interactions-fundamental studies and applications. In *Fluid Dynamics Conference* (1996), p. 1977.
- [334] ZHI, G. Advances in perturbation finite difference (pdf) method [j]. *Advances in Mechanics* 2 (2000), 003.
- [335] ZHOU, Q., YAO, Z., HE, F., AND SHEN, M. A new family of high-order compact upwind difference schemes with good spectral resolution. *Journal of Computational Physics* 227, 2 (2007), 1306–1339.
- [336] ZHU, H., AND QIU, J. Adaptive runge–kutta discontinuous galerkin methods using different indicators: one-dimensional case. *Journal of Computational Physics* 228, 18 (2009), 6957–6976.
- [337] 傅德薰, 马延文, ET AL. 计算流体力学. 高等教育出版社, 2002.
- [338] 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.
- [339] 姜宗林, 滕宏辉, AND 刘云峰. 气相爆轰物理的若干研究进展. 力学进展 42, 2 (2012), 129–140.
- [340] 应隆安, AND 滕振寰. 双曲型守恒律方程及其差分方法, 1991.
- [341] 张德良, ET AL. 计算流体力学教程. 高等教育出版社, 2010.
- [342] 张旭东, 范宝春, 潘振华, AND 归明月. 旋转爆轰自持机理的数值研究. 弹道学报 23, 1 (2011), 1–4.

- [343] 张薇, 刘云峰, 姜宗林, ET AL. 气相爆轰波胞格尺度与点火延迟时间关系研究.
- [344] 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.
- [345] 潘振华, 范宝春, AND 归明月. T 型管内流动气体中爆轰绕射过程的数值模拟. 爆炸与冲击 34, 6 (2014), 709–715.
- [346] 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.
- [347] 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.
- [348] 王昌建, AND 徐胜利. 直管内胞格爆轰的基元反应数值研究. 爆炸與衝擊 25, 5 (2005), 405–416.
- [349] 申义庆, 高智, AND 杨顶辉. 一阶双曲方程的摄动有限差分格式. 计算物理 22, 6 (2005), 650–656.
- [350] 童秉纲, 孔祥言, 邓国华, ET AL. 气体动力学. 高等教育出版社, 1990.
- [351] 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.
- [352] 胡宗民, 牟乾辉, 张德良, AND 姜宗林. 爆轰波在弯管内传播过程数值分析. 计算物理 21, 5 (2004), 408–414.
- [353] 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.
- [354] 赵宁, 余彦, AND 唐维军. Rm 不稳定性数值模拟方法. 计算数学 (2001).
- [355] 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).
- [356] 高智, AND 柏威. 对流扩散方程的摄动有限体积 (pfv) 方法及讨论. 力学学报 36, 1 (2004), 88–92.

发表文章目录

- [1] Peng J, Shen Y. A novel weighting switch function for uniformly high-order hybrid shock-capturing schemes[J], International Journal of Numerical Methods in Fluids, DOI: 10.1002/fld.4285, 2016.
- [2] Peng J, Shen Y. Improvement of weighted compact scheme with multi-step strategy for supersonic compressible flow[J]. Computers and Fluids, 2015, 115: 243-255.
- [3] Peng J, Shen Y. A Seventh Order Hybrid Weighted Compact Scheme Based on WENO Stencil for Hyperbolic Conservation Laws, SIAM Conference on Computational Science and Engineering, Salt Lake City, U.S.A., 2015.
- [4] , . ¾ ±º «¶ ¸ [C]. f ´ , £, 2015.
- [5] , . GPU¼ «¶ [C]. µ ¸¹ f , , <, 2014.
- [6] Peng J, Shen Y. Accuracy improvement of compact type shock capture scheme with multi-step strategy for supersonic turbulent flow[C], The Eleventh World Congress on Computational Mechanics, Barcelona, Spain, 2014.
- [7] , . ¶ ¼ ½ , ¼° → [C]. µ ½ ¸¹ ¼ f » , „£½“, , 2014.
- [8] , . ¾ ±º «¶ ¸ [C]. LHD2015 ¾ , ±¾®, 2015.
- [9] , . GPU¼ «¶ [C]. LHD2014 ¾ , ±¾®, 2014.
- [10] , , . 0.8 ° ½ ¸ [C]. LHD2013 ¾ , °± , 2013.

简历

» $\pm \frac{3}{4}$

£¬ $\neg^{\frac{1}{2}}$ $\neg 1989$ 2^3 £¬ [F] \dot{i} f \dot{i} r \odot^c \dot{i} i£

$\dot{i}^{\frac{1}{2}}$

2006 9 2010 7 AE

2010 9 2013 3 £¬ $\pm \frac{3}{4} \odot^{\frac{1}{2}} \dot{i}^{\frac{1}{2}}$ £¬ c \dot{i} £¬ £ $\odot \frac{1}{2} \dot{i}^{\frac{1}{2}}$ \boxtimes^3

2013 9 £¬ \dot{i} f \dot{i} £ $\neg^2 \odot^c$ \dot{i} £¬ £ $\odot^{\frac{1}{4}}$ f

$^1 \boxtimes$

£

\dot{i}

$\frac{1}{4}$ f £¬' $\dot{g}^2 \mathbb{C}$ [F] GPU±. $\neg \dot{i}$

j $\cdot \frac{1}{2}$

$\mu \pm \frac{3}{4} \odot \pm \mu \pm \pm L \cdot \cdot 15^\circ$ f

100190

E-mail: pengjun62@163.com

致谢

1 — Kr© 1 1 £ ± . £ « »½ » J ♪ ¾ L¼²©f ¡¢² ¢² ¢ »¼ p
— µ N, ° r©µ ³£ ¶ °®£¬¶ [F] °‡ [F] £ a, ¶ ° ¼¡£,
[F] µ ³ ¡£ £ a » `n° ü ÿ ° £ ¬ ¶ ¼ · ³£ µ ³ £ ¬ 磬
»³¢ µ [F] ¡£ ' — ô J‡ ' µ ÷ µ · " ¾P£ ¹, £ £ o' ¡¢ o' ¡¢
oo —¡¢ ¡¢ ¡¢ ¡¢ ¡¢ ³¢ · ½ ¾ ¡¢ c c c 塉 — N ¹,
[F] £ ¬ , £ µ J š£ , ²¢ 廳 ¡£ , ' ®µ — ° f £ ¡£ ' ' p
l« µ — ² » £ [F] ¶ ¼µ µij ¡£
l ¶ [F] ½ £ a ² » ½ £ ½ [F]