

隐式时间推进

牛顿法：

以模型方程为例：

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

做一阶隐式离散：

$$U^{n+1} - U^n = \Delta t \left(-\frac{\partial F(U^{n+1})}{\partial x} + S(U^{n+1}) \right)$$

暂时写成：

$$U^{n+1} - U^n = \Delta t R(U^{n+1})$$

隐式推进问题转化为，求解 U^{n+1} ，使得：

$$G(U^{n+1}) = U^{n+1} - U^n - \Delta t R(U^{n+1}) = 0$$

即求解 $G(U^{n+1}) = 0$

随后使用牛顿法求解上面这个非线性方程，假设初始猜测值为 $(U^k, G(U^k))$

我们希望：

$$G(U^k + \Delta U) = 0$$

展开有：

$$G(U^k + \Delta U) \approx G(U^k) + G'(U^k) \Delta U = 0$$

则：

$$\begin{aligned} G'(U^k) \Delta U &= -G(U^k) \\ J_g(U^k) \Delta U &= -G(U^k) \end{aligned}$$

更新U：

$$U^{k+1} = U^k + \Delta U$$

最终直到 $G(U^i) = 0$ ，即认为 $U^{n+1} = U^i$

雅可比矩阵处理：

牛顿法计算中需要 $J_g(U)$ ，做推导如下：

$$J_g(U) = (U - U^n - \Delta t R(U))' = I - \Delta t \frac{\partial R(U)}{\partial U}$$

考虑到

$$R(U) = -\frac{\partial F(U)}{\partial x} + S(U)$$

所以隐式时间推进就落到了计算某个量关于U的雅可比矩阵 $J_R(U)$, 数值计算雅可比:

$$J_R^{ij} = \frac{\partial R_i}{\partial U_j} = \frac{R_i(U + \epsilon e_j) - R_i(U)}{\epsilon}$$

$$J_R = \begin{bmatrix} \frac{\partial R_1}{\partial U_1} & \cdots & \frac{\partial R_1}{\partial U_n} \\ \vdots & \frac{\partial R_i}{\partial U_j} & \vdots \\ \frac{\partial R_m}{\partial U_1} & \cdots & \frac{\partial R_m}{\partial U_n} \end{bmatrix}$$

优化:

部分隐式离散

毫无疑问, 每次步进计算一个新的数据 U^{n+1} , 要求解一个 $G(U) = 0$, 假设牛顿迭代需要10次, 那就需要解10次 $J\Delta U = G$, 每一次都要计算一个 J 和 G , 假设 U 有3个元素, 一个 J 就要计算3次扰动 U 之后的 R 向量, 一个 G 又需要算一次 R 向量, 合计就是一次步进要计算40次 R ;

前面的描述中 $R = -F_x + S$ 中的全部项都采用隐式离散, 那如果 F_x 采用显式离散, S 采用隐式离散, R 的复杂程度大大减弱, 就不需要再每次隐式计算中反复重新对 F 进行插值差分和通量差分分裂

过程整理如下:

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

只隐式离散源项:

$$U^{n+1} - U^n = \Delta t \left(-\frac{\partial F(U^n)}{\partial x} + S(U^{n+1}) \right)$$

$$U^{n+1} - U^n = \Delta t (R(U^{n+1}))$$

$$G(U^{n+1}) = U^{n+1} - U^n - \Delta t R(U^{n+1}) = 0$$

其中: $R(U^{n+1}) = -\frac{\partial F(U^n)}{\partial x} + S(U^{n+1})$

后续的牛顿迭代和雅可比计算方法都是针对新的 $R(U)$ 来处理的, 对流项采用显式离散之后, 对流导数项成为已知常数, 计算 R 的雅可比等同计算 S 的雅可比:

$$J_R^{ij} = \frac{\partial R_i}{\partial U_j} = \frac{R_i(U + \epsilon e_j) - R_i(U)}{\epsilon} = \frac{S_i(U + \epsilon e_j) - S_i(U)}{\epsilon}$$

牛顿阻尼

在牛顿迭代过程中, 通过加入阻尼主动减缓更新的步长, 这对于强非线性, 强刚性问题非常有效, 能够很好地防止解不收敛的情况, 尤其是针对出现负质量分数的情况, 能够很好的保证解的物理可行性;

两种阻尼方法是非常合适的:

物理约束驱动阻尼: 当某些物理量为负数的时候, 缩短迭代步长, 直至步长不会过长导致违反物理约束;

相对变化阻尼: 控制最大的阻尼系数为 C , 同时依据残差来动态变化阻尼系数, 残差越大, 阻尼系数越小, 步进越谨慎, 残差越小, 阻尼系数越大, 步进越放松

```
error = max(|du| / (|u| + eps))
alpha = min(1.0, C / error)
```

