Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems

Zhiping Li

LMAM and School of Mathematical Sciences
Peking University

一维函数总变差的定义

- 一维网格函数总变差的定义：

$$TV(Q) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} |Q_i - Q_{i-1}|.$$

- 一般一维函数 $q(x)$ 总变差的定义：记剖分集合 $\Xi = \{-\infty = \xi_0 < \xi_1 < \cdots < \xi_N = \infty,\ N \in \mathcal{N}\}$, 定义

$$TV(q) = \sup_{\Xi} \sum_{i=1}^{N} |q(\xi_i) - q(\xi_{i-1})|.$$

- $TV(Q)$, $TV(q)$ 有界的必要条件：

$$Q_i,\ q(x) \to q^{\pm},\ 当\ i, x \to \pm\infty.$$

一维函数总变差的定义

- 一般一维函数 $q(x)$ 总变差的另一种定义：

$$TV(q) = \limsup_{\epsilon \to 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\epsilon} |q(x) - q(x-\epsilon)| \, dx.$$

- 当 q 广义可微时，以上定义的等价定义：

$$TV(q) = \int_{-\infty}^{\infty} |q'(x)| \, dx.$$

TVD 格式的定义

注意到对流方程（包括许多非线性守恒律方程式）的弱解的总变差不变, 即 $TV(q(\cdot,t)) = TV(q(\cdot,0)), \forall t > 0$, 而一般非线性守恒律方程式的弱解的总变差不增, 即 $TV(q(\cdot,t_1)) \le TV(q(\cdot,t_0))$, $\forall t_1 > t_0 \ge 0$. 我们自然希望相应的数值算法不增加总变差.

Definition

一个两层格式称为是 TVD (Total Variation Deminishing) 的, 若对任意的 Q^n 都有 $TV(Q^{n+1}) \le TV(Q^n)$.

Definition

一个两层格式称为是 保单调的 (monotonicity-preserving), 若 $Q_i^n \ge Q_{i+1}^n, \forall i$, 则有 $Q_i^{n+1} \ge Q_{i+1}^{n+1}, \forall i$.

- 相容的守恒型的 TVD 格式一定是保单调的 (习题).

基于 REA 算法的 TVD 方法——重构是关键

由于对对流方程（以及一大类非线性守恒律方程式），我们有

- 在发展步

$$TV(\tilde{q}^n(\cdot, t_{n+1})) = (\leq) TV(\tilde{q}^n(\cdot, t_n));$$

- 在平均步 $$TV(Q^n) \leq TV(\tilde{q}^n(\cdot, t_{n+1}));$$

- 因此, 只需在重构步保证 $TV(\tilde{q}^n(\cdot, t_n)) \leq TV(Q^n)$,

则得到的方法一定是 TVD 的. 值得指出：“重构步是TVD 的”是“REA算法是TVD的”充分条件, 但并非必要条件.

TVD 斜率限制器方法一：minmod 斜率限制器

显然, $\sigma_i^n \equiv 0$ 给出的一阶迎风格式是 TVD 的. 在解光滑处具有二阶精度又是 TVD 的常见的方法有 minmod 斜率, superbee 限制器, MC (monotonized central-difference) 限制器, 等.

- minmod : $\sigma_i^n = \text{minmod}\left(\frac{Q_i^n - Q_{i-1}^n}{\Delta x}, \frac{Q_{i+1}^n - Q_i^n}{\Delta x}\right)$, 其中

$$\text{minmod}(a,b) = \begin{cases} a, & \text{if } |a| \le |b| \text{ and } ab > 0; \\ b, & \text{if } |a| > |b| \text{ and } ab > 0; \\ 0, & \text{if } ab \le 0. \end{cases}$$

相当于，当迎风和背风的差商同号时选择其中模较小的量, 即在 Beam-Warming 和 Lax-Wendroff 方法中选斜率模较小的一个, 因此, 在解的非极值点邻域的光滑处有二阶精度; 而当两者符号相反, 或至少有一个为零（Q_i^n 为极值点）时, 取 $\sigma_i^n = 0$, 即选择迎风格式. 重构是TVD的. 数值效果见 p. 104, fig. 6.2.

TVD 斜率限制器方法二：superbee 斜率限制器

- superbee : $\sigma_i^n = \text{maxmod}(\sigma_i^{(1)}, \sigma_i^{(2)})$, 其中

$$\sigma_i^{(1)} = \text{minmod}\left(\frac{Q_{i+1}^n - Q_i^n}{\Delta x}, 2\frac{Q_i^n - Q_{i-1}^n}{\Delta x}\right)$$

$$\sigma_i^{(2)} = \text{minmod}\left(2\frac{Q_{i+1}^n - Q_i^n}{\Delta x}, \frac{Q_i^n - Q_{i-1}^n}{\Delta x}\right)$$

maxmod(a, b), a, b 同号时取模较大者, 否则取零. 这相当于, 当 $\Delta Q_{i+\frac{1}{2}}^n$, $\Delta Q_{i-\frac{1}{2}}^n$ 同号且相差较小时, 取模较大者; 同号且相差较大时取两倍的模较小者; 否则取零. (重构一般并非TVD的)

优点：在解的非极值点邻域的光滑处有二阶精度, 且对间断的分辨率更高. 基于superbee 重构的REA算法是TVD的.

缺点：拐点处会变得越来越陡峭. 数值效果见 p. 104, fig. 6.2.

TVD 斜率限制器方法三：MC 斜率限制器

- MC : $\sigma_i^n = \text{minmod}\left(\frac{Q_{i+1}^n - Q_{i-1}^n}{2\Delta x}, 2\frac{Q_{i+1}^n - Q_i^n}{\Delta x}, 2\frac{Q_i^n - Q_{i-1}^n}{\Delta x}\right).$

这相当于, 当 $\Delta Q_{i+\frac{1}{2}}^n, \Delta Q_{i-\frac{1}{2}}^n$ 同号且相差较小时, 取两者平均值, 即此处格式取为 Fromm 格式; 同号且相差较大时取两倍的模较小者; 否则取零. MC重构一般不是TVD的.

基于MC重构的REA算法在解的非极值点邻域的光滑处有二阶精度, 且是TVD的. 数值效果见 p. 104, fig. 6.2. 对很大一类问题, MC- 限制器都是较好的选择. (MC-limiter: Monotonized Central-difference limiter)

分片线性重构的 REA 算法的通量公式

以上斜率限制器方法也可以写成通量差的形式

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}(F_{i+\frac{1}{2}}^n - F_{i-\frac{1}{2}}^n).$$

对分片线性重构有: $F_{i-\frac{1}{2}}^n = aQ_i^n + bQ_{i-1}^n + c\sigma_i^n + d\sigma_{i-1}^n,$

$$F_{i+\frac{1}{2}}^n = \bar{a}Q_{i+1}^n + \bar{b}Q_i^n + \bar{c}\sigma_{i+1}^n + \bar{d}\sigma_i^n$$

- 由守恒型格式的相容性, 当 $\sigma_i^n = \sigma_{i-1}^n = 0$, $Q_i^n = Q_{i-1}^n = Q$ 时, 应该有 $F_{i-\frac{1}{2}}^n = f(Q)$, 因此得 $a + b = \bar{a} + \bar{b} = f(Q)/Q$.
- 对给定的斜率限制器型的方法, 一般总可以用代数方法解出系数 $a, b, c, d, \bar{a}, \bar{b}, \bar{c}, \bar{d}$, 从而给出相应的数值通量.
- 例如, 对对流方程 $f(q) = \bar{u}q$, 斜率无限制时由特征线法可得 $F_{i-\frac{1}{2}}^n = (\bar{u}^+ Q_{i-1}^n + \bar{u}^- Q_i^n) + \frac{1}{2}(1 - \frac{|\bar{u}|\Delta t}{\Delta x})(\bar{u}^+ \sigma_{i-1}^n \Delta x - \bar{u}^- \sigma_i^n \Delta x).$

分片线性重构的 REA 算法的通量公式

分片线性重构的相应数值通量一般可根据以下公式直接计算：

- $\tilde{q}^n(x_{i-\frac{1}{2}}, t) = \tilde{q}^n(x_{i-\frac{1}{2}} - \bar{u}(t-t_n), t_n)$
  $= Q^n_{i-1} + (x_{i-\frac{1}{2}} - \bar{u}(t-t_n) - x_{i-1})\sigma^n_{i-1}$,
- 和 $F^n_{i-\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta t}\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(\tilde{q}^n(x_{i-\frac{1}{2}}, t))\, dt.$

然后,再用通量差公式$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}(F^n_{i+\frac{1}{2}} - F^n_{i-\frac{1}{2}})$ 得到算法.

基于 REA 算法的通量限制器方法

对流方程$f(q)=\bar{u}q$ 基于分片线性重构的 REA 算法的数值通量
$F^n_{i-\frac{1}{2}}=(\bar{u}^+Q^n_{i-1}+\bar{u}^-Q^n_i)+\frac{1}{2}(1-\frac{|\bar{u}|\Delta t}{\Delta x})(\bar{u}^+\sigma^n_{i-1}\Delta x-\bar{u}^-\sigma^n_i\Delta x)$
也可以写为以下形式:

$$F^n_{i-\frac{1}{2}}=(\bar{u}^+Q^n_{i-1}+\bar{u}^-Q^n_i)+\frac{1}{2}|\bar{u}|\left(1-\frac{|\bar{u}|\Delta t}{\Delta x}\right)\delta^n_{i-\frac{1}{2}}.$$

其通量限制器方法就是将 $\delta^n_{i-\frac{1}{2}}$ 取为 $\Delta Q^n_{i-\frac{1}{2}}=Q^n_i-Q^n_{i-1}$ 的某种限制形式.

例如, 当取 $\delta^n_{i-\frac{1}{2}}\equiv\Delta Q^n_{i-\frac{1}{2}}$ 时, 得到的便是 Lax-Wendroff 格式.
适当地选取 $\delta^n_{i-\frac{1}{2}}$, 则可以得到高分辨率格式.

常用的通量限制器

通常，我们可以取 $\delta^n_{i-\frac{1}{2}} = \phi(\theta^n_{i-\frac{1}{2}})\Delta Q^n_{i-\frac{1}{2}}$，其中

$$\theta^n_{i-\frac{1}{2}} = \frac{\Delta Q^n_{I-\frac{1}{2}}}{\Delta Q^n_{i-\frac{1}{2}}}, \qquad I = \begin{cases} i-1, & \text{if } \bar{u} > 0, \\ i+1, & \text{if } \bar{u} < 0. \end{cases}$$

- 可以看出，在极值点以外的光滑点处，$\theta^n_{i-\frac{1}{2}} \sim 1$.
- 而在间断处 $\theta^n_{i-\frac{1}{2}}$ 的取值则距离 1 较远.

对流方程的用通量限制器表出的 REA 算法($\nu = \frac{\bar{u}\Delta t}{\Delta x} > 0$)

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \nu(Q_i^n - Q_{i-1}^n) \qquad \text{(迎风通量差/限制器表出的高阶通量差)}$$
$$- \frac{1}{2}\nu(1-\nu)[\phi(\theta^n_{i+\frac{1}{2}})(Q^n_{i+1} - Q^n_i) - \phi(\theta^n_{i-\frac{1}{2}})(Q^n_i - Q^n_{i-1})].$$

常用的通量限制器—— 线性方法

- 迎风格式: $\phi(\theta) = 0.$
- Lax-Wendroff 格式: $\phi(\theta) = 1.$
- Beam-Warming 格式: $\phi(\theta) = \theta.$
- Fromm 格式: $\phi(\theta) = \frac{1}{2}(1+\theta).$

注: 这些方法都不具有高分辨率.

常用的高分辨率通量限制器

- minmod: $\phi(\theta) = \text{minmod}(1, \theta)$.
- Superbee: $\phi(\theta) = \max(0, \min(1, 2\theta), \min(2, \theta))$.
- MC: $\phi(\theta) = \max(0, \min((1+\theta)/2, 2, 2\theta))$.
- Van Leer: $\phi(\theta) = \frac{\theta+|\theta|}{1+\theta}$.

注： 对流方程基于通量限制器表出的 REA 算法($\nu = \frac{\bar{u}\Delta t}{\Delta x} > 0$)

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \nu(Q_i^n - Q_{i-1}^n) \quad \text{(迎风通量差/限制器表出的高阶通量差)}$$
$$- \frac{1}{2}\nu(1-\nu)[\phi(\theta_{i+\frac{1}{2}}^n)(Q_{i+1}^n - Q_i^n) - \phi(\theta_{i-\frac{1}{2}}^n)(Q_i^n - Q_{i-1}^n)],$$

在形式上更便于我们分析其 TVD 性质.

Harten 定理

minmod 限制器的 TVD 性质由其构造 $\tilde{q}^n(x, t_n)$ 容易看出. 以下 Harten 定理是证明格式为 TVD 的基本工具.

Theorem

考虑格式

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - C_{i-1}^n(Q_i^n - Q_{i-1}^n) + D_i^n(Q_{i+1}^n - Q_i^n),$$

其中系数 C_{i-1}^n, D_i^n 可以依赖于 Q^n. 若系数满足关系

$$C_{i-1}^n \geq 0, \quad D_i^n \geq 0, \quad C_i^n + D_i^n \leq 1, \quad \forall i.$$

则有 $TV(Q^{n+1}) \leq TV(Q^n)$.

证明: 由格式有 $|Q_{i+1}^{n+1} - Q_i^{n+1}| \leq (1 - C_i^n - D_i^n)|Q_{i+1}^n - Q_i^n| + C_{i-1}^n|Q_i^n - Q_{i-1}^n| + D_{i+1}^n|Q_{i+2}^n - Q_{i+1}^n|$. 将该不等式对 i 从 $-\infty$ 到 $+\infty$ 求和即得定理结论. ■

分析用通量限制器表出的 REA 算法的 TVD 性质

例如, 对流方程的用通量限制器表出的 REA 算法($\nu = \frac{\bar{u}\Delta t}{\Delta x} > 0$)

$$
\begin{aligned}
Q_i^{n+1} &= Q_i^n - \nu(Q_i^n - Q_{i-1}^n) \qquad \text{(迎风通量差/限制器表出的高阶通量差)} \\
&\quad - \frac{1}{2}\nu(1-\nu)[\phi(\theta_{i+\frac{1}{2}}^n)(Q_{i+1}^n - Q_i^n) - \phi(\theta_{i-\frac{1}{2}}^n)(Q_i^n - Q_{i-1}^n)].
\end{aligned}
$$

注意到由 $\theta_{i+\frac{1}{2}}^n$ 的定义有 $Q_{i+1}^n - Q_i^n = (Q_i^n - Q_{i-1}^n)/\theta_{i+\frac{1}{2}}^n$, 因此, 对该格式我们可以令

$$
\begin{cases}
C_{i-1}^n = \nu + \frac{1}{2}\nu(1-\nu)\left(\dfrac{\phi(\theta_{i+\frac{1}{2}}^n)}{\theta_{i+\frac{1}{2}}^n} - \phi(\theta_{i-\frac{1}{2}}^n)\right), \\
D_i = 0.
\end{cases}
$$

分析用通量限制器表出的 REA 算法的 TVD 性质

此时, 格式满足 Harten 定理条件 $\Leftrightarrow 0 \le C^n_{i-1} \le 1, \forall i.$

- 首先注意到, 当网格满足 CFL 条件, 即 $0 < \nu = \bar{u}\Delta t/\Delta x \le 1$ 时,

$$|\Phi| \triangleq \left|\frac{\phi(\theta_1)}{\theta_1} - \phi(\theta_2)\right| \le 2, \quad \forall \theta_1, \theta_2, \quad \Rightarrow \quad 0 \le \nu^2 \le C^n_{i-1} \le \nu(2-\nu) \le 1.$$

若 $\Phi < -2$ (或> 2), 则$\exists \nu \in (0,1)$ s.t. $C^n_{i-1} < 0$ (或 > 1). 进一步的分析:

1. 当 $\theta > 0$, 即 ΔQ 不变号时, 此时线性重构的斜率 σ^n_{i-1} 应该与 $\Delta Q^n_{i-\frac{1}{2}}$ 同号 ($\because \phi(\theta^n_{i-\frac{1}{2}})\Delta Q^n_{i-\frac{1}{2}} = \sigma^n_{i-1}\Delta x$), 所以应该有 $\phi(\theta) > 0$.

从通量限制器的角度考虑, 这可理解为, $\theta > 0$ 时通量限制器不应改变高阶修正通量的方向, 即$\delta^n_{i-\frac{1}{2}} = \phi(\theta^n_{i-\frac{1}{2}})\Delta Q^n_{i-\frac{1}{2}}$ 与$\Delta Q^n_{i-\frac{1}{2}}$ 同号. 此时, 加通量限制器的高阶修正通量仍是反扩散通量, 否则则会加剧耗散.

分析用通量限制器表出的 REA 算法的 TVD 性质

2. 当 $\theta^n_{i-\frac{1}{2}} = \dfrac{\Delta Q^n_{i-\frac{3}{2}}}{\Delta Q^n_{i-\frac{1}{2}}} < 0$ 时, Q^n_{i-1} 为极值点, 此时为保证格式 TVD, 线性重构的斜率 $\sigma^n_{i-\frac{1}{2}}$ 应该取为 0, 即 $\phi(\theta) = 0, \forall\, \theta \le 0.$

3. 在 $\left|\dfrac{\phi(\theta_1)}{\theta_1} - \phi(\theta_2)\right| \le 2$ 中分别取 $\theta_1 < 0$ 和 $\theta_2 \le 0$, 则由 (1), (2) 得

$$0 \le \phi(\theta) \le 2, \quad 0 \le \frac{\phi(\theta)}{\theta} \le 2, \quad \forall\theta > 0, \qquad \phi(\theta) = 0, \quad \forall\theta \le 0.$$

这可以等价地表示为

$$0 \le \phi(\theta) \le \mathrm{minmod}(2, 2\theta).$$

事实上, 在 (1), (2) 的前提下, 上式与 $\left|\dfrac{\phi(\theta_1)}{\theta_1} - \phi(\theta_2)\right| \le 2$ 等价.

满足这些条件的限制器可参见p.117, Fig 6.6.

在解光滑处达到二阶精度对通量限制器的附加条件

对流方程$f(q)=\bar{u}q$ 基于分片线性重构和通量限制器的数值通量:

$$F^n_{i-\frac{1}{2}} = (\bar{u}^+ Q^n_{i-1} + \bar{u}^- Q^n_i) + \frac{1}{2}|\bar{u}|\left(1-\frac{|\bar{u}|\Delta t}{\Delta x}\right)\phi(\theta^n_{i-\frac{1}{2}})\Delta Q^n_{i-\frac{1}{2}}.$$

再由通量差公式$Q^{n+1}_i = Q^n_i - \frac{\Delta t}{\Delta x}(F^n_{i+\frac{1}{2}} - F^n_{i-\frac{1}{2}})$ 得到相应的算法.
我们希望该算法不仅在解间断处可拥有 TVD 性质, 还希望其在解光滑处有二阶逼近精度.

将真解 $q(x,t)$ 代入格式(6.40) 并在 (x_i,t_n) 处做 Taylor 展开, 得格式的局部截断误差主项为

$$\frac{\Delta x}{2}\nu(1-\nu)\Big(\phi(\theta^n_{i+\frac{1}{2}}) - \phi(\theta^n_{i-\frac{1}{2}})\Big)q_x(x_i,t_n)$$
$$-\frac{\Delta x^2}{4}\nu(1-\nu)\Big(\phi(\theta^n_{i-\frac{1}{2}}) + \phi(\theta^n_{i+\frac{1}{2}}) - 2\Big)q_{xx}(x_i,t_n).$$

在解光滑处达到二阶精度对通量限制器的附加条件

设限制函数 $\phi(\cdot)$ Lipschitz 连续. 注意到, 在解的光滑的非极值点处 $\theta^n_{i-\frac{1}{2}} = 1 + O(\Delta x)$ 以及 $\theta^n_{i+\frac{1}{2}} - \theta^n_{i-\frac{1}{2}} = O(\Delta x^2)$. 则可推得, 要使逼近精度达到二阶, 必须令 $\phi(1) = 1$.

综合以上分析结果, 我们得到在解的非极值点的光滑处达到二阶精度的 TVD 通量限制器的条件:

1. $0 \le \phi(\theta) \le \mathrm{minmod}(2, 2\theta)$. (TVD 条件)
2. $\phi(1) = 1$, $\phi(\theta)$ Lipschitz 连续(至少在$\theta = 1$ 处). (非极值点光滑处有二阶精度的条件)

在解光滑处达到二阶精度的 TVD 通量限制器

Sweby 发现, 取 Lax-Wendroff ($\phi(\theta)=1$) 和 Beam-Warming ($\phi(\theta)=\theta$) 的凸组合外加限制 $0 \le \phi(\theta) \le \mathrm{minmod}(2, 2\theta)$ 得到的限制器的数值表现最好(见p.117, Fig 6.6(b)). 例如, MC 和 Van Leer 限制器(见p. 115, (6.39b)), 两者在 $\theta = 1$ 的邻域内是光滑的, 这对提高整体逼近精度有益.

事实上, 若 $\phi(\theta) >$ Superbee, 则波型将被过度压缩（这一点上 Superbee 已经初现端倪, 见p.104, Fig 6.2(b)）.

若 $\phi(\theta) <$ minmod, 则格式耗散过度（这一点在 minmod 上也已显现, 见p.104, Fig 6.2(a)）.

方程组的通量限制

方程组 $q_t + Aq_x = 0$ 的 Lax-Wendroff 格式的数值通量为

$$F^n_{i-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}A(Q^n_{i-1} + Q^n_i) - \frac{1}{2}\frac{\triangle t}{\triangle x}A^2(Q^n_i - Q^n_{i-1}),$$

也可表示为迎风通量基础上加上一个反扩散校正通量的形式

$$F^n_{i-\frac{1}{2}} = (A^+ Q^n_{i-1} + A^- Q^n_i) + \frac{1}{2}|A|(I - \frac{\triangle t}{\triangle x}|A|)(Q^n_i - Q^n_{i-1}).$$

由于跳跃间断是沿特征方向按相应的特征速度传播的, 我们必须先将 $Q^n_i - Q^n_{i-1}$ 关于 A 的右特征向量系 $\{r^p\}^m_{p=1}$ 做特征分解

$$Q^n_i - Q^n_{i-1} = \sum_{p=1}^{m} \alpha^p_{i-\frac{1}{2}} r^p$$

然后再在特征方向上引入通量限制器 $\tilde{\alpha}^p_{i-\frac{1}{2}} = \alpha^p_{i-\frac{1}{2}}\phi(\theta^p_{i-\frac{1}{2}})$.

方程组的通量限制器

其中

$$\theta^p_{i-\frac{1}{2}} = \frac{\alpha^p_{I-\frac{1}{2}}}{\alpha^p_{i-\frac{1}{2}}}, \qquad I = \begin{cases} i-1, & \text{if } \lambda^p > 0; \\ i+1, & \text{if } \lambda^p < 0, \end{cases}$$

通量限制器 $\phi(\cdot)$ 满足条件:

1. $0 \le \phi(\theta) \le \text{minmod}(2, 2\theta)$, (TVD 条件).
2. $\phi(1) = 1$, 且在1点李氏连续, (非极值点光滑处有二阶精度).
3. $\phi(1/\theta) = \phi(\theta)/\theta$, (对称性条件: 见(6.47) 和习题 6.8).

其中对称性是指若 $Q_{-i} = Q_i$, $i = 0, 1, \cdots$, 则重构后的斜率应该满足 $\sigma_{-i} = -\sigma_i$. 对对流方程, 当 $\bar{u} > 0$ 时, 由(6.30), (6.32) 和(6.34) 得 $\sigma_{-1} = \phi(\theta_{-\frac{1}{2}})\Delta Q_{-\frac{1}{2}}$, $\sigma_1 = \phi(\theta_{\frac{3}{2}})\Delta Q_{\frac{3}{2}}$. 由此及对称性即可推出条件3. (对称性条件在固壁和振荡壁边界条件的数值处理中起到关键作用.)

方程组的使用了限制器的高分辨率 TVD 数值通量

方程组的使用了限制器的高分辨率 TVD 数值通量可以写为

$$F^n_{i-\frac{1}{2}} = (A^+ Q^n_{i-1} + A^- Q^n_i) + \tilde{F}^n_{i-\frac{1}{2}},$$

其中
$$\tilde{F}^n_{i-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}|A|(I - \frac{\triangle t}{\triangle x}|A|)\sum_{p=1}^{m}\phi(\theta^p_{i-\frac{1}{2}})\alpha^p_{i-\frac{1}{2}} r^p.$$

由于 $|A|r^p = |\lambda^p|r^p$, 因此有

$$\tilde{F}^n_{i-\frac{1}{2}} = \sum_{p=1}^{m}\frac{1}{2}|\lambda^p|(1 - \frac{\triangle t}{\triangle x}|\lambda^p|)\phi(\theta^p_{i-\frac{1}{2}})\alpha^p_{i-\frac{1}{2}} r^p.$$

方程组的高分辨率 TVD 波限制器

注意, 间断跳跃 $Q_i^n - Q_{i-1}^n$ 被分解成了方程组的沿 m 个特征方向 r^p 按相应的特征速度 λ^p 传播的波 $\mathcal{W}_{i-\frac{1}{2}}^p = \alpha_{i-\frac{1}{2}}^p r^p$.

以上给出的通量限制器方法也可以视为对特征波的高分辨率修正的方法, 或波限制器方法, 令 $\tilde{\mathcal{W}}_{i-\frac{1}{2}}^p = \tilde{\alpha}_{i-\frac{1}{2}}^p r^p$.

波限制器方法可以自然地推广到非线性方程组. 此时有

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}(\mathcal{A}^+\Delta Q_{i-\frac{1}{2}}^n + \mathcal{A}^-\Delta Q_{i+\frac{1}{2}}^n) - \frac{\Delta t}{\Delta x}(\tilde{F}_{i+\frac{1}{2}}^n - \tilde{F}_{i-\frac{1}{2}}^n),$$

其中 $\mathcal{A}^+\Delta Q_{i-\frac{1}{2}}^n$ 和 $\mathcal{A}^-\Delta Q_{i+\frac{1}{2}}^n$ 分别为相应点处 Riemann 问题的右行和左行涨落波(fluctuation), $\tilde{F}_{i-\frac{1}{2}}^n = \sum_{p=1}^m \frac{1}{2}|s_{i-\frac{1}{2}}^p|(1 - \frac{\Delta t}{\Delta x}|s_{i-\frac{1}{2}}^p|)\tilde{\mathcal{W}}_{i-\frac{1}{2}}^p$ 为 $(x_{i-\frac{1}{2}}, t_n)$ 处 m 族波的高分辨率修正项, $s_{i-\frac{1}{2}}^p$ 为第 p 族波的波速.

数值边界条件 —— 虚拟单元的引入

在实际计算时, 无论是初边值问题还是初值问题, 我们都需要在有限的物理区域的边界上处理物理的或人工的边界条件.

处理边界条件的方法可以分为两大类:

- 在边界附近处设计特殊的格式, 以便将边界条件与内点上的格式相匹配, 用以更新边界附近内点上下一时间步的近似解.
- 首先, 通过引入虚拟（也称为影子、辅助）单元适当扩大物理区域, 扩大后的区域通常称为计算区域; 然后, 利用内部区域上近似解的信息和边界条件定义虚拟单元上每个时间步初始时刻的函数值; 最后, 将所有的内部单元用同样的格式进行更新, 得到下一时间步的近似解.

后一类方法需要引入所谓的虚拟单元.

数值边界条件 —— 虚拟单元的引入

例如, 对于一维问题的周期边界条件: $q(a,t) = q(b,t), \forall t > 0$.
可取 $x_{\frac{1}{2}} = a$, $x_{N+\frac{1}{2}} = b$, 令

$$Q^n_{-1} = Q^n_{N-1},\ Q^n_0 = Q^n_N,\ Q^n_{N+1} = Q^n_1,\ Q^n_{N+2} = Q^n_2.$$

则 $(x_{-\frac{3}{2}}, x_{-\frac{1}{2}})$, $(x_{-\frac{1}{2}}, x_{\frac{1}{2}})$ 为物理区域左端边界外引入的两个虚拟单元, $(x_{N+\frac{1}{2}}, x_{N+\frac{3}{2}})$, $(x_{N+\frac{3}{2}}, x_{N+\frac{5}{2}})$ 为物理区域右端边界外引入的两个虚拟单元.

当使用高分辨率格式时, 有可能需要引入更多的虚拟单元.

一维对流问题及其入流(inflow)和出流(outflow)边界

在区间 $[a, b]$ 上考虑对流方程 $q_t + \bar{u} q_x = 0$, $(\bar{u} > 0)$. 此时

- 边界 $x = a$ 称为入流边界, 在入流边界上必须给出边界条件. 例如, $q(a, t) = g_0(t)$.
- 边界 $x = b$ 称为出流边界, 在出流边界上不能提边界条件.
- 但若在计算 Q_i^{n+1} 时所使用的算法的模板包含了 x_i 右边的节点, 例如, Lax-Wendroff 格式, 则必须考虑在出流边界 $x = b$ 处给出数值边界条件.
- 但若在计算 Q_i^{n+1} 时所使用的算法是单边格式, 例如, 迎风格式、Beam-Warming 格式等, 则在出流边界 $x = b$ 处无需给出任何数值边界条件.

一维对流问题 —— 出流边界上的数值边界条件

出流边界上格式的选择和数值边界条件的处理对算法整体稳定性和精度都关系重大. 常用的方法一般分为两大类.

- 一类是在出流边界附近改用单边迎风类格式. 通常由格式转换产生的杂波会向区域内部传播, 从而带来误差污染, 甚至可能造成算法的不稳定性, 因此必须加以注意. 不过, Lax-Wendroff 格式对背风波有较强的衰减, 与其配合产生的算法可以证明是稳定的.

- 另一类方法是采用外推法定义虚拟单元上的值, 然后在出流边界上直接使用与内部节点相同的格式. 最简单有效的方法是零阶外推, 即用常数函数外推

$$Q^n_{N+1} = Q^n_N, \qquad Q^n_{N+2} = Q^n_N.$$

  由于, 对于一维问题, 零阶外推不会产生伪反射波, 因此产生的算法是稳定的. 一阶外推可能产生稳定性问题, 一般不推荐使用.

一维对流问题—— 入流边界上的边界条件

入流边界上处理边界条件的常用方法一般也分为两大类.

- 一类是利用边界条件直接计算通量函数. 例如
$$F^n_{\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta t}\int_{t_n}^{t_{n+1}} \bar{u}q(a,t)\,dt = \frac{\bar{u}}{\Delta t}\int_{t_n}^{t_{n+1}} g_0(t)\,dt$$
或其二阶近似 $F^n_{\frac{1}{2}} = \bar{u}g_0(t_n + \frac{\Delta t}{2})$.

- 另一类更一般（通常也更简单）的方法是利用边界条件和解的性质（特征、黎曼不变量）定义虚拟单元上的函数值, 然后用与内部相同的格式计算通量 $F^n_{\frac{1}{2}}$ 及其它量. 例如, 由
$q(x,t_n) = q(a, t_n + \frac{a-x}{\bar{u}}) = g_0(t_n + \frac{a-x}{\bar{u}})$ 知
$$Q^n_0 = \frac{1}{\Delta x}\int_{a-\Delta x}^{a} g_0(t_n + \frac{a-x}{\bar{u}})\,dx = \frac{\bar{u}}{\Delta x}\int_{t_n}^{t_n+\frac{\Delta x}{\bar{u}}} g_0(\tau)\,d\tau,$$
或二阶近似 $Q^n_0 = g_0(t_n + \frac{\Delta x}{2\bar{u}})$. 同理 $Q^n_{-1} = \frac{\bar{u}}{\Delta x}\int_{t_n+\frac{\Delta x}{\bar{u}}}^{t_n+\frac{2\Delta x}{\bar{u}}} g_0(\tau)\,d\tau$.

一维线性声学方程组及其特征与黎曼不变量

一维线性声学方程组（见p.28, (2.52)）

$$\begin{cases} p_t + K_0 u_x = 0, \\ \rho_0 u_t + p_x = 0. \end{cases}$$

其中 p 和 u 是压力和介质运动速度的微扰量，ρ_0 是介质的质量密度，K_0 是介质的体压缩模量．方程组的系数矩阵及其特征向量为

$$A = \begin{bmatrix} 0 & K_0 \\ 1/\rho_0 & 0 \end{bmatrix}, \qquad r^1 = \begin{bmatrix} -\rho_0 c_0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad r^2 = \begin{bmatrix} \rho_0 c_0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

相应的特征值为 $\lambda^1 = -c_0$，$\lambda^2 = c_0$，$c_0 = \sqrt{K_0/\rho_0}$，黎曼不变量为 $w^1(x,t) = \frac{1}{2Z_0}(-p + Z_0 u)$，$w^2(x,t) = \frac{1}{2Z_0}(p + Z_0 u)$，其中 $Z_0 = \rho_0 c_0$．

一维线性声学方程组的分段常态初值问题

考虑一维线性声学方程组的分段常态初值问题的以下初值

$$(p,u)=\begin{cases}(p_L,u_L), & x<a_1;\\ (p^0(x),u^0(x)), & a_1<x<b_1;\\ (p_R,u_R), & x>b_1.\end{cases}$$

则其解 (见p.60) 有两个依赖于 $(p^0(x),u^0(x))$ 的分别向左右传播的波, 速度分别为 $-c_0$ 和c_0. 当时间 $t>(b_1-a_1)/c_0$ 之后, 两个波将彻底分离, 并在 $[a_1,b_1]$ 上形成一个新的状态: 其黎曼不变量1-波为 $w_R^1=\frac{1}{2Z_0}(-p_R+Z_0u_R)$, 2-波为 $w_L^2=\frac{1}{2Z_0}(p_L+Z_0u_L)$. 由 $q=Rw$, 得由 (p,u) 表示的新状态为:

$$p=Z_0(w_L^2-w_R^1)=\frac{1}{2}(p_L+p_R)+\frac{Z_0}{2}(u_L-u_R),$$
$$u=(w_R^1+w_L^2)=\frac{1}{2Z_0}(p_L-p_R)+\frac{1}{2}(u_L+u_R).$$

一维线性声学方程组的无反射边界条件

以上问题的黎曼不变量满足

$$\begin{cases} w^1(b_1, t) = w^1(b_1 + c_0 t, 0) = \frac{1}{2Z_0}(-p_R + Z_0 u_R), \\ w^2(a_1, t) = w^2(a_1 - c_0 t, 0) = \frac{1}{2Z_0}(p_L + Z_0 u_L), \end{cases} \quad \forall t \geq 0.$$

在数值计算时, 取计算区域 $(a, b) \supsetneq (a_1, b_1)$. 我们希望在 a, b 处给出适当的边界条件, 使得声波传出时不会在边界处产生向内传播的波. 这样的边界条件称为无反射边界条件, 或吸收边界条件.

对于 Godunov 型的算法, 0-阶外推是一个不错的方法. 一般的做法是先将方程对角化, 然后对每一个黎曼不变量所满足的对流方程定义相应的入流和出流边界条件.

一维线性声学方程组基于0-阶外推的无反射边界条件

对于一维线性声学方程组，在 a 点，$W^1 = (-Q^1 + Z_0 Q^2)/2Z_0$ 是出流波，而 $W^2 = (Q^1 + Z_0 Q^2)/2Z_0$ 是入流波．于是，由入流边界条件和对出流边界的 0-阶外推法得

$$W_0^2 = W_{-1}^2 = \frac{1}{2Z_0}(p_L + Z_0 u_L), \qquad W_0^1 = W_{-1}^1 = W_1^1.$$

注意，由于解也满足 $W_1^2 = \frac{1}{2Z_0}(p_L + Z_0 u_L)$，因此，入流波的边界条件也可以由 0-阶外推法得到．即所有变量，无论入流还是出流，都可由 0-阶外推法得到．

一维线性声学方程组基于0-阶外推的无反射边界条件

所有变量，无论入流还是出流，都可由 0-阶外推法得到这一事实的意义在于，在实际计算时，我们不必将方程对角化，而可以直接用 0-阶外推法给出边界条件

$$Q_0 = Q_1, \quad Q_{-1} = Q_1, \qquad Q_{N+1} = Q_N, \quad Q_{N+1} = Q_N.$$

在此边界条件下，相邻单元间的黎曼问题不会产生任何波. 特别地，没有产生向区域内部传播的所谓反射波. 在边界上向外传出的物理波是由 0-阶外推法直接给出的.

一维线性声学方程组有入射波时的边界条件处理

在有些问题中, 我们需要在边界上给出入射波边界条件.

例如, 对于右行波 $W^2(x,t)$, 我们可以在左端边界点 a 上给出边界条件

$$W^2(a,t) = \sin(\omega t) \quad (\triangleq g_0(t)),$$

而对左行波则采用 0-阶外推法给出无反射边界条件.

例如, 设 $Q_1 = W_1^1 r^1 + W_1^2 r^2$, 则由以上原则可给出有二阶逼近精度的逼近条件(见 p. 133, (7.9))

$$\begin{aligned} Q_0 &= W_1^1 r^1 + \sin(\omega(t_n + \Delta x/2c_0))r^2 \\ &= Q_1 + (\sin(\omega(t_n + \Delta x/2c_0)) - W_1^2)r^2. \end{aligned}$$

一维线性声学方程组的固壁边界条件

所谓固壁, 是指由区域内部传播到该部分边界上的波会被完全(既无耗散的) 反射回区域内部. 我们可以根据物理解的特性给出相应的物理边界条件.

例如, 对于一维声波, 我们可以令 $u(a,t)=0$, 即在固壁处介质的运动速度为零. 我们有以下重要事实:

- 设初始条件 $(p^0(x), u^0(x))$ 满足 $u^0(a)=0$ 和

$$p^0(a-\xi)=p^0(a+\xi),\quad u^0(a-\xi)=-u^0(a+\xi),\quad \forall\xi>0.$$

  则一维线性声学方程组全空间 Cauchy 问题的解限制在 $x>a$ 上恰为半空间 $x>a$ 上固壁问题的解.

一维线性声学方程组的固壁边界条件数值处理

基于以上重要事实, 我们可以根据等价 Cauchy 问题初值条件的对称性（反对称性）得到Cauchy 问题的解在边界 a 上的关系式 (此即全反射边界条件或固壁边界条件)

$$w^2(a,t) = w^2(a-c_0t,0) = \frac{1}{2Z_0}\Big(p_0(a-c_0t)+Z_0u_0(a-c_0t)\Big)$$

$$= \frac{1}{2Z_0}\Big(p_0(a+c_0t)-Z_0u_0(a+c_0t)\Big) = -w^1(a+c_0t,0) = -w^1(a,t)$$

因此我们可以给出以下数值固壁边界条件:

$$\begin{cases} Q_0: & p_0 = p_1, \quad u_0 = -u_1; \\ Q_{-1}: & p_{-1} = p_2, \quad u_{-1} = -u_2. \end{cases}$$

事实上, 可以验证：在 CFL 条件下在一个时间步内, 以上式为初值的黎曼问题的解在 $x_{\frac{1}{2}} = a$ 处的确满足 $u^* = 0$ (见习题7.2(a)).

一维线性声学方程组的振荡壁边界条件数值处理

若在边界 $x = a$ 处边界有小幅振荡，即 $u(a,t) = U(t)$，我们可以做变量替换 $v(x,t) = u(x,t) - U(t)$. 这样 $v(x,t)$ 就满足固壁边界条件 $v(a,t) = u(a,t) - U(t) = 0$. 我们可以考虑借鉴 (p,v) 的数值固壁边界条件，给出 (p,u) 的数值振荡壁边界条件：

$$\begin{cases} Q_0: & p_0 = p_1, \quad u_0 = 2U(t_n) - u_1; \\ Q_{-1}: & p_{-1} = p_2, \quad u_{-1} = 2U(t_n) - u_2. \end{cases}$$

事实上，可以证明：在 CFL 条件下在一个时间步内，以上式为初值的黎曼问题的解在 $x_{\frac{1}{2}} = a$ 处满足 $u^* = U(t_n)$ (见习题7.2(b)). 这就验证了以上数值振荡壁边界条件的合理性.

注: 若限制器满足对称性条件$\phi(1/\theta) = \phi(\theta)/\theta$，则可以验证对相应的高分辨率格式使用以上数值固壁(振荡壁)边界条件的合理性.

作业: 6.3, 6.4, 7.1, 7.2(a)

Thank You!