

高阶特征线性及其与 semi-Lagrangian 方法的比较

张会生 许传炬
(厦门大学数学系, 福建 厦门 361005)

摘 要 特征线性与 semi-Lagrangian 方法都是处理流体方程时间离散两种有效的方法. 它们比经典的半隐格式, 如 Backward-Euler/Adams-Bashforth 方法有更好的稳定性. 本文提出一种基于高阶空间离散的特征线法, 通过稳定性、精度和计算复杂性与 semi-Lagrangian 方法进行比较, 分析了高阶特征线法的有效性和适用性, 并从数值试验上对分析结果进行验证.

关键词 特征线法; semi-Lagrangian 方法; 谱元法; 平流扩散问题

中图分类号 O 241. 82 **文献标识码** A

1 引 言

在粘性流体的高阶数值模拟中, 常隐式处理线性项而非线性项则被显式处理. 这种半隐方法的主要动机是为了在时间离散后得到一个线性系统, 同时保证在扩散占优问题中对时间的离散格式有好的稳定性. 但是这一方法在高雷诺数流的情况下, 即对流占优时, 要求时间步长满足严格的稳定性限制. 为了克服这一困难, 人们提出了许多改进方法, 其中 semi-Lagrangian 方法和特征线法是两种比较有效的方法.

特征线法最初是在有限元框架下引进的, 其中 Pironneau(1982)^[4]做出了开创性工作. 他指出, 当应用向后插分格式时, 特征线法是绝对稳定的, 并给出了这一方法的误差估计. 近来一些工作试图将其改进而应用在高阶方法中.

特征线法的主要思想是通过引入 Lagrangian 变量, 将基于 Euler 变量的速度关于时间的导数写成 Lagrangian 导数形式, 然后对其进行时间离散, 其结果是将对对流项的处理转化为速度场沿特征线的传输. 因此特征线法的主要任务有两个: 一是已知到达点的情况下精确定位任意时刻粒子在特征线上的位置; 二是已知速度场在固定网格点上的值的情况下求出速度在特征脚上的值. 特征线法的优点是: 从理论上讲, 当对时间离散应用向后差分格式时, 特征线法是绝对稳定的, 因而我们可以用较大的时间步长. 另外特征线法直观, 物理意义明确, 容易用程序实现. 但特征线法也存在一些未解问题: 首先是特征脚的定位和解在特征脚上的取

收稿日期: 2003-05-08

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(19801029)

值,为了保持较高精度,必然要用到高阶 Lagrangian 插值,这会耗费较大的计算量. 其次,如果空间离散是基于多区域或谱元法时,必须判定特征脚位于哪一个区域元. 第三,由于特征脚的定位是近似的,目前还没有一般有效的方法从理论上对特征线法的稳定性和收敛性进行严格的分析.

semi-Lagrangian 方法同特征线法一样也是对 Lagrangian 导数进行离散,但避免了特征线法中对特征脚的定位和解在特征脚上赋值时的高阶插值. 取而代之的是解一输运方程.

semi-Lagrangian 方法对一类方法十分有效,但也存在一定的缺陷,特别当来流具有较大梯度时,输运问题的入口边界条件难以确定^[1]. 本文旨在对这两种方法在稳定性,精度和计算复杂性等方面进行比较,并对 Karniadakis^[2]等人最近提出的一个高阶特征线法进行改进,提出了一个新的基于谱元空间离散的特征线法,分析了其有效性和适用性.

2 一个基于谱元空间离散的特征线法

为叙述方便,我们考虑标准的平流扩散问题: v, f 给定, ν 为正常数(扩散系数),边界条件及初始条件已知,找 u 使得:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \cdot \nabla u - \nu \Delta u = f, x \in \Omega, t > 0 \quad (1)$$

这里 $\Omega \subset R^d (d = 1, 2, 3)$, $v = (v_1, \dots, v_d)$ 是速度场. 在实际应用中, u 可以是流场速度或流场中污染物的分布量.

特征线法和 semi-Lagrangian 方法有一共同的出发点,即首先将方程(1)写成以下的 Lagrangian 形式

$$\frac{Du}{Dt} - \nu \Delta u = f \quad (2)$$

这里 Du/Dt 是 Lagrangian 导数. 对(2)式进行 Q 阶 Euler 向后差分格式的时间离散,我们得到

$$\frac{\alpha_0 u^{n+1} + \alpha_1 \tilde{u}^n + \dots + \alpha_Q \tilde{u}^{n+1-Q}}{\Delta t} - \nu \Delta u^{n+1} = f^{n+1} \quad (3)$$

这里 $\alpha_q, q = 0, \dots, Q$, 是格式系数, Δt 是时间步长, n 是时间序号, u^{n+1} 是 u 在 $t = t^{n+1}$ 时刻的近似. 而 $\tilde{u}^{n+1-q}, q = 1, \dots, Q$ 是 $u(\chi(x, t^{n+1}, \tau); \tau)$ 在 $\tau = t^{n+1-q}$ 时刻的近似值. 给定 x 和 $t, \chi(x, t; \tau)$ 是以下特征方程的解

$$\begin{cases} \frac{d\chi}{d\tau} = v(\chi, \tau), 0 < \tau < t \\ \chi(x, t; t) = x \end{cases} \quad (4)$$

在后文中我们记 $\chi^{n+1-q} = \chi(x, t^{n+1}; t^{n+1-q}), q = 1, \dots, Q$. 由 χ 满足的方程知, χ 定义了 t 时刻到达 x 位置的粒子的运行轨迹. 因此 $\tilde{u}^{n+1-q}, q = 1, \dots, Q$ 是 t^{n+1} 时刻到达 x 位置的粒子在 $t = t^{n+1-q}$ 时刻的速度. 当 $\tilde{u}^{n+1-q}, q = 1, \dots, Q$ 计算出来后,根据(3)式计算 u^{n+1} 就变成了用谱元法解一 Helmholtz 问题. 特征线法和 semi-Lagrangian 方法的主要差别在第一步,即在 $\tilde{u}^{n+1-q}, q = 1, \dots, Q$ 的计算中.

由上可知, $\tilde{u}^{n+1-q}, q = 1, \dots, Q$, 是 $u(\chi^{n+1-q}, t^{n+1-q})$ 的近似值, χ 是(4)的解. 因而要计算 \tilde{u}^{n+1-q} , 首先应求 χ^{n+1-q} . 下面我们详细描述这一算法.

首先,我们以网格点为到达点,记为 x_n , 当前时刻每一个在网格点的粒子沿特征线回溯一

个时间步长所在的空间点我们称为特征脚,记为 χ_i , 即 $\chi_i = \chi^n$. 同样任意的 χ^{n+1-q} 都可以看成以 χ^{n+2-q} 为到达点的粒子沿特征线回溯一个时间步长所得的特征脚,一旦 χ 得到定位, \tilde{u}^{n+1-q} 可通过插值得到.

取 $\chi_a = x$, 则 $\chi_i = \chi^n$, 这里 χ 满足

$$\begin{cases} \frac{d\chi}{d\tau} = v(\chi, \tau), t^n < \tau < t^{n+1} \\ \chi(x, t^{n+1}; t^{n+1}) = x \end{cases} \tag{5}$$

确定 χ_i 的二阶算法为:

$$\begin{aligned} \hat{\chi} &= \chi_a - \frac{\Delta t}{2} v(\chi_a, t^n) \\ \chi_i &= \chi_a - \Delta t v\left(\hat{\chi}, t^n + \frac{\Delta t}{2}\right) \end{aligned} \tag{6}$$

这一算法是二阶 Runge-Kutta 方法的一个应用^[3].

更一般地,当 $q > 1$, 以 χ^{n+2-q} 为到达点,求 $\chi_i = \chi^{n+1-q}$ 的二阶算法为

$$\begin{aligned} \hat{\chi} &= \chi^{n+2-q} - \frac{\Delta t}{2} v(\chi^{n+2-q}, t^{n+2-q}) \\ \chi_i &= \chi^{n+2-q} - \Delta t v\left(\hat{\chi}, t^{n+1-q} + \frac{\Delta t}{2}\right) \end{aligned}$$

一旦计算得到 $\chi(x, t^{n+1}; t^{n+1-q}), \tilde{u}^{n+1-q}$ 可通过 u 在 t^{n+1-q} 时刻在 $\chi(x, t^{n+1}; t^{n+1-q})$ 点的 Lagrangian 插值求得. 由于 \tilde{u}^{n+1-q} 的计算多次用到插值运算,因而当网格较密时,此处用的计算时间较多.

上述方法可被推广应用到下面的 Navier-Stokes 方程中去:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla)u - \nu \Delta u + \nabla p = 0, \text{在 } \Omega \text{ 中} \\ \nabla \cdot u = 0, \text{在 } \Omega \text{ 中} \end{cases}$$

将其写成 Lagrangian 导数形式后运用向后 Euler 差分公式得到:

$$\frac{\alpha_0 u^{n+1} + \alpha_1 \tilde{u}^n + \dots + \alpha_Q \tilde{u}^{n+1-Q}}{\Delta t} - \nu \Delta u^{n+1} + \Delta p^{n+1} = 0, \quad \nabla \cdot u^{n+1} = 0,$$

这里 $\tilde{u}^{n+1-q}, q = 1, \dots, Q$, 也可以通过 χ^{n+1-q} 的定位和 u 在 χ 上的插值得到. 这里,对给定的 x 和 $t, \chi(x, t, \tau)$ 满足

$$\begin{cases} \frac{d\chi}{d\tau} = u(\chi, \tau), 0 < \tau < t \\ \chi(x, t; t) = x \end{cases}$$

以网格点为到达点 χ_a , 求特征脚 $\chi_i = \chi^n$ 的二阶算法为

$$\begin{aligned} \hat{\chi} &= \chi_a - \frac{\Delta t}{2} u(\chi_a, t^n) \\ \chi_i &= \chi_a - \Delta t u\left(\hat{\chi}, t^n + \frac{\Delta t}{2}\right) \end{aligned} \tag{7}$$

与平流扩散方程不同的是,这里函数 u 不是预先给定的,而是计算过程中得到的: $u(\chi_a, t^n)$ 为 u

在 t^n 时刻在网格点的值, 是前一时间步计算得到的已知量. 而 $u\left(\tilde{x}, t^n + \frac{\Delta t}{2}\right)$ 是未知量, 首先, 在时间变量上需要引进适当的近似方法来计算得到 $u\left(x, t^n + \frac{\Delta t}{2}\right)$, 然后, 再利用空间上的 Lagrangian 插值计算 $u\left(\tilde{x}, t^n + \frac{\Delta t}{2}\right)$. 在时间方向的近似中, 最简单的是外插法. 下面给出一个 p 阶 Euler 插值方法.

若 u_1, u_2, \dots, u_p 分别是 $u(t)$ 在 t_1, t_2, \dots, t_p 时刻和值, 则 $u(t)$ 的 p 阶插值近似公式为:

$$u(t) = \beta_1 u_1 + \beta_2 u_2 + \dots + \beta_p u_p \quad (8)$$

其中

$$\beta_i = \frac{\prod_{j=1, j \neq i}^p (t_j - t)}{\prod_{j=1, j \neq i}^p (t_j - t_i)}$$

一旦得到 x^n , 我们可应用同样的格式顺序计算 x^{n-1}, x^{n-2}, \dots . 而 $\bar{u}(x^{n+1-q}, t^{n+1-q})$ 的计算与平流情形完全一样.

3 与 semi-Lagrangian 方法的比较以及适用性讨论

本节将从稳定性, 精度以及计算复杂性等方面讨论上节引入的特征线法的有效性, 并与 semi-Lagrangian 方法进行比较, 讨论它们的适用性. 首先我们简要介绍 semi-Lagrangian 方法的计算步骤.

与传统的特征线法不同, semi-Lagrangian 方法中 \bar{u}^{n+q} 的计算是通过解对流方程来实现的, 其理论基础是下面的引理.

引理^[1] 给定函数 v , 我们有 $\bar{u}^{n+1} = \bar{u}(x, t^{n+1})$, 其中 $\bar{u}(x, t^{n+1})$ 是下面对流方程在 $\tau = t^{n+1}$ 时刻的解

$$\begin{cases} \frac{\partial \bar{u}(x, \tau)}{\partial \tau} = -v(x, \tau) \cdot \nabla \bar{u}(x, \tau), & t^n < \tau < t^{n+1} \\ \bar{u}(x, t^n) = u(x, t^n) \end{cases} \quad (9)$$

类似的, 可以证明 $\bar{u}^{n+1-q} = \bar{u}(x, t^{n+1})$, $q = 2, \dots, Q$, 其中 $\bar{u}(x, t^{n+1})$ 是下面对流方程在 $\tau = t^{n+1}$ 时刻的解

$$\begin{cases} \frac{\partial \bar{u}(x, \tau)}{\partial \tau} = -v(x, \tau) \cdot \nabla \bar{u}(x, \tau), & t^{n+1-q} < \tau < t^{n+1} \\ \bar{u}(x, t^{n+1-q}) = u(x, t^{n+1-q}) \end{cases}$$

注 有关上述对流问题边界条件的详细讨论参见[1]及其参考文献, 在此我们指出, 在 semi-Lagrangian 方法中, 解上述对流问题所需边界条件的确定是个困难的问题, 这个问题限制了 semi-Lagrangian 方法在复杂来流问题中的应用.

对流问题(9)可用一显式方法来计算. 最常用的是 Runge-Kutta 方法, 其具体计算过程如下:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{取初始值 } \bar{u}^{(1)} = u \\ \text{设 } \bar{u}^m \text{ 已知} \\ R^1 = -v^{(m)} \cdot \nabla \bar{u}^m \\ R^2 = -v^{(m+\frac{1}{2})} \cdot \nabla \left(\bar{u}^m + \frac{1}{2} \Delta \tau R^1 \right) \\ R^3 = -v^{(m+\frac{1}{2})} \cdot \nabla \left(\bar{u}^m + \frac{1}{2} \Delta \tau R^2 \right) \\ R^4 = -v^{(m+\frac{1}{2})} \cdot \nabla \left(\bar{u}^m + \frac{1}{2} \Delta \tau R^3 \right) \\ \bar{u}^{m+1} = \bar{u}^m + \frac{\Delta \tau}{6} (R^1 + R^2 + R^3 + R^4) \end{array} \right.$$

上式迭代循环从 $m = 1$ 开始进行到 $m = M$, 这里 $M = \Delta t / \Delta \tau$, $\Delta \tau$ 称为子步长, $v^{(m)}$ 是 v 在 $\tau = t^{n+1-\varrho} + m \Delta \tau$ 的逼近值, 循环结束时得到的 \bar{u}^M 即为所要的 \bar{u}^* .

有了对 semi-Lagrangian 方法计算过程的详细描述, 我们现在来比较特征线法与 semi-Lagrangian 方法的计算量.

现在我们用弱形式的谱元法来求解上述所有的问题. 假若我们将计算区域分为 K 个元, 每个元的多项式阶数为 N . 由于这两种算法的主要差别是在时间离散过程中对 $\bar{u}^{n+1-\varrho}$ 的求法不同, 因此只需考虑两者在 $\bar{u}^{n+1-\varrho}$ 上对应同一元的计算量.

特征线法在计算 $\bar{u}^{n+1-\varrho}$ 过程中主要有两个步骤: χ 的定位和 u 在 χ 点的插值. 可以看出, 在这一计算过程中, u 在空间上的 Lagrangian 插值的计算量的数量级最高, 因而总的计算量的量级便是这一插值的计算量级与其计算次数之积, 我们也只需考虑需要几次这样的插值. 在标准的对流扩散问题中 v 是已知量, 因而在 χ 的计算中不需要这样的插值, 只在最后对 u 在 χ 点的插值中需要 1 次. 但是在 Navier-Stokes 方程中 $v = u$ 是未知量, 因而在 χ 的计算中, 也需要这样的插值运算.

而对 semi-Lagrangian 方法, 对 u 的偏导数的计算量占主导地位, 求 $\bar{u}^{n+1-\varrho}$ 总的计算量的量级便是这一计算量的量级与其所需次数之积. 我们也只需分析需要几次这样的求偏导运算以及每次偏导运算的计算量. 由前面的计算过程可知, 共需要 $4qM$ 次这样的运算. 下表列出了 Lagrangian 空间插值与求偏导运算的计算量

	一维	二维	三维
插值计算 (特征线法)	$2N^3 + N^2$	$5N^4 + N^3$	$N^6 + 7N^5 + N^4$
求偏导运算 (semi-Lagrangian 方法)	N^2	$2N^3$	$3N^4$

因而, 从上述分析来看, semi-Lagrangian 方法要比特征线法省时. 但在谱元法中网格剖分是通过增加区域个数, 即 K 的值来达到的. N 的值一般不会很大 (典型应用中, N 取从 6 到 12 值). 另外 $\bar{u}^{n+1-\varrho}$ 的计算量只是整个数值模拟计算量中的一部分, 并非决定性因素, 其后还要用谱元法解一 Helmholtz 问题. 因此特征线法与 semi-Lagrangian 方法在计算量上的差别在计算一维和二维问题时并不十分明显, 但在计算三维问题时, 由于计算量级相差过大, 会限制到特征线

法的应用.

4 数值结果

为了显示高阶特征线法的有效性, 我们数值考察其在求解平流扩散问题时的稳定性和精度, 并与 semi-Lagrangian 方法比较.

例 考虑一维平流扩散方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f, \quad x \in [0, 1],$$

这里 a 是正常数. 在下面的计算中, 我们固定 a 为 1, 并取 $\nu = 0.01$.

取精确解为以下解析函数:

$$u(x, t) = x^\alpha \frac{2\pi - 1 + \sin(2\pi t)}{2\pi} \sin \pi x \quad (10)$$

这里 α 是非负常数. 边界条件及初值由上述精确解确定. 图 1 显示了精确解在 α 取不同值时的行为. 从图中可以看出, 当 $\alpha \geq 1$ 时, 入口处 (即 $x = 1$ 处) 的解是平滑的, 即梯度为零, 因此可以期望 semi-Lagrangian 方法能给出较好的精度. 而当 $\alpha = 0$ 时, $\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=0} \neq 0$, 这时 semi-Lagrangian 方法的精度预计会受到影响^[1].

在计算中我们将计算区域分为 $K = 6$ 个区域元, 每个区域元中的多项式阶数 $N = 9$. 在计算中 $Q = 2$, 对于 semi-Lagrangian 方法, 我们没有在计算运输问题时使用子迭代, 即令 $\Delta\tau = \Delta t$. 图 2 中三图分别为 $\alpha = 0, \alpha = 1, \alpha = 2$ 时两种方法的 L^2 计算误差比较. 从结果可以看出, 两种方法得到的 $\log - \log$ 直线的斜率为 2, 这说明两种方法都有预期的关于时间的 2 阶精度 (对应 $Q = 2$), 但当 $\alpha = 0$ 时, 特征线法具有更高的精度, 这验证了前面提到的对 semi-Lagrangian 方法应用中的一些局限.

对于稳定性, 我们发现, 当 ν 变化而 α 在 0, 1, 2 中取值时, 特征线法都是绝对稳定的, 即当以任意步长计算时, 算法都是收敛的. 而 semi-Lagrangian 方法却对步长有一定的限制^[1].

5 结 论

高阶特征线法与 semi-Lagrangian 方法相比, 对入流不平稳问题在精度上有了一定的提高, 并且突破了 semi-Lagrangian 方法中由于稳定性的要求而对步长的限制. 虽在计算量上有较大的付出, 但仍不失为一种有效的方法.

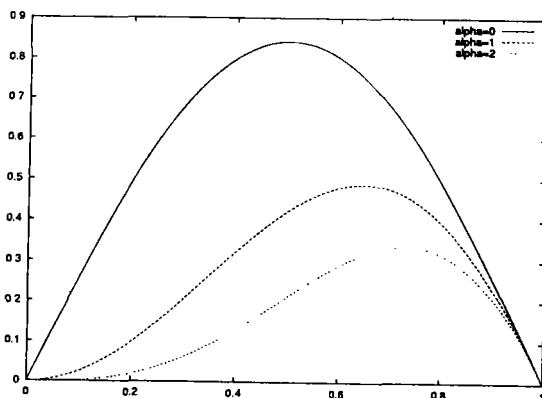


图 1 由 (10) 定义精确解在 $t=1$ 时刻, 当 $\alpha = 0, 1, 2$ 时的图像

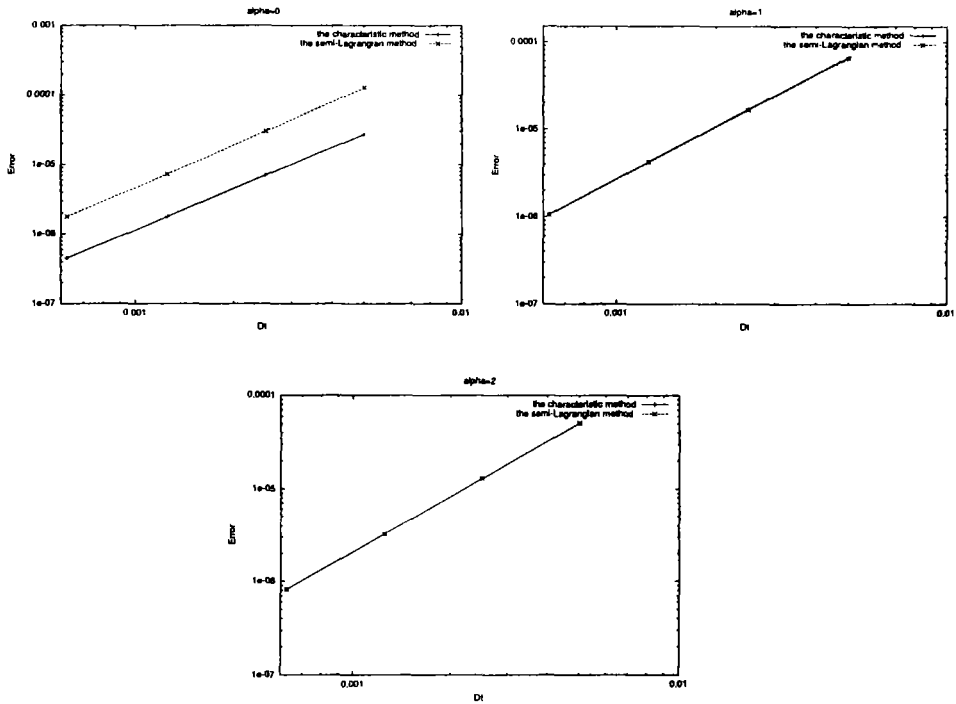


图 2 分别由两种方法计算得到的 u_N 在 L^2 范数下的误差比较(log - log 标度)

参 考 文 献

- [1] Xu C J, Pasquetti R. On the efficiency of the semi-Lagrangian method for the incompressible flow, *Inter. J Numer. Meth. Fluids*, 2001, 35:319—340.
- [2] Xiu D B, George E K. A semi-Lagrangian high-order method for Navier-Stokes equations. *J. of Computational Physics*, 2001, 172:658—684.
- [3] Canuto C, Hussaini M Y, Quarteroni A, Zang Z A. *Spectral methods in fluid dynamics*, Springer, New York, Berlin, Heidelberg, London, Paris Tokyo, 1987.
- [4] Pironeau O. *On the transport-diffusion algorithm and its application equations*, Spinger-Verlag, 1998

A High Order Characteristic Method and Comparison with the Semi-Lagrangian Method

Zhang huisheng Xu Chuanju

(Department of Mathematics, Xiamen University, Fujian, Xiamen 361005)

Abstract The characteristic method and semi-Lagrangian method are efficient ways to deal with the time-discretization of fluids equations, which have better stability properties as compared with the classical semi-implicit Backward-Euler/Adames-Bashforth method. In this paper we introduce a characteristic method based on high order space discretization and compare it with the semi-Lagrangian method in term of stability, accuracy and computational complexity. Lastly, we show some numerical results.

Key words characteristic method, semi-Lagrangian method, spectral element method, advection-diffusion problem