

原始变量守恒形式控制方程的时间准确性分析*

张怀宝,王光学,王靖宇

(中山大学物理学院,广东广州 510006)

摘要:基于压力、速度和温度的原始变量为自变量的守恒形式的控制方程可应用于定常流动问题,但是在求解非定常问题,例如某一典型激波管问题时,激波后温度出现过冲现象,即使通过细化网格、提高空间格式精度或者换用其他通量格式仍不能消除,这表明误差可能来自该方法本身。采用一维 Euler 方程对该方法进行数值分析。分析结果表明,数值误差来自时间项。通过构造相应的双时间步方程,虚拟时间项采用原始变量,而物理时间项采用守恒变量,并在两个相邻物理时间步内作为定常问题求解,可以收敛到相应的守恒形式,消除上述误差,得到准确的非定常数值解。

关键词:原始变量;守恒律;激波管问题;计算流体力学;双时间步

中图分类号:V211.3 **文献标志码:**A **文章编号:**1001-2486(2019)02-037-07

Time accuracy analysis of primitive variable-based conservative form governing equations

ZHANG Huaibao, WANG Guangxue, WANG Jingyu

(School of Physics, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510006, China)

Abstract: The governing equations using primitive properties of pressure, velocity and temperature as dependent variables, but constructed in the conservative form can be applied for calculating solutions for steady state problems. When the method was recently used to simulate a canonical shock-tube problem, however, overshoot of temperature was observed after the shock. Moreover, the errors cannot be eliminated by using fine grid, high spatial order of accuracy or any alternative inviscid fluxes schemes that are available, implying the numerical discrepancy may be caused by the method itself. Numerical analysis was conducted on the method using the one-dimensional Euler equations as the model equation system. It can be shown that the numerical error specifically arises from the discretized time terms. A dual-time-looping technique was developed to address the issue. It used conservative variables in physical-time derivatives while primitive variables for pseudo-time terms. An inner iteration procedure within two adjacent physical-time steps were driven until a steady state was reached. The resulting governing equation converged to the corresponding conservative form in time, and the time-accurate solution was recovered.

Keywords: primitive variables; conservation law; shock-tube problem; computational fluid dynamics; dual-time-looping

传统的可压缩流体求解器通常采用以守恒变量为自变量的守恒形式的控制方程,其中为代表的国内外比较著名的求解器有 HOSTA^[1], TRIP^[2], OpenCFD^[3], FUN3D^[4], OpenFOAM^[5]等。采用有限体积方法,积分形式下的控制方程一般可以表示为:

$$\iiint_V \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} dV + \oint_A (\mathbf{F} - \mathbf{F}_d) \cdot \mathbf{n} dA = \iiint_V \mathbf{S} dV \quad (1)$$

式中, \mathbf{Q} 为守恒变量, \mathbf{F} 为无黏通量, \mathbf{F}_d 为黏性通量, \mathbf{S} 为源项, t 为时间, \mathbf{n} 为单元控制面的法向矢量。通过链式法则,在时间项上引入雅克比矩阵 $\mathbf{J} = \partial \mathbf{Q} / \partial \mathbf{P}$,可以将上述守恒变量守恒形式的控制方程转换为以原始变量 \mathbf{P} 为自变量的守恒形式的控制方程^[6-7],即

$$\mathbf{J} \iiint_V \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} dV + \oint_A (\mathbf{F} - \mathbf{F}_d) \cdot \mathbf{n} dA = \iiint_V \mathbf{S} dV \quad (2)$$

对于一维 Euler 方程,上述各个变量的定义为:

$$\begin{cases} \mathbf{Q} = [\rho, \rho u, \rho E]^T \\ \mathbf{P} = [p, u, T]^T \\ \mathbf{F} = [\rho u, \rho u^2 + p, (\rho E + p)u]^T \\ \mathbf{F}_d = [0, 0, 0]^T \\ \mathbf{S} = [0, 0, 0]^T \end{cases} \quad (3)$$

其中: ρ 为密度; p 为静压力; T 为温度; u 为速度; $E = e + \frac{1}{2}u^2$ 为单位质量的总能, e 为单位质量的内能。

* 收稿日期:2018-02-28

基金项目:国家部委基金资助项目(41406030101)

作者简介:张怀宝(1985—),男,山东高密人,副研究员,博士,E-mail:zhanghb28@mail.sysu.edu.cn

在某些具体的数值运算中,都需要用到原始变量,例如半点处的变量重构多采用原始变量^[8];另外,对黏性流体的求解,动力黏度和传热系数都是温度的函数^[9],而黏性应力的计算需要采用速度梯度;边界条件,例如无滑移边界,一般假设壁面压强的法向梯度为零^[10]。而采用守恒变量形式的控制方程时,需要在每一个时间步推进后,将更新的守恒变量转换成原始变量,进行相关计算。特别地,当涉及热化学非平衡问题时,温度是总能的隐函数,直接求取温度比较困难,实际一般采用迭代方法,时间耗费较大,而采用原始变量形式,无须该转换过程^[11]。另外,采用原始变量形式可以大大简化时间隐格式中雅克比矩阵的构造,推导解析形式的雅克比矩阵相对容易,而实现数值形式的雅克比矩阵更为直接^[11]。

本文采用的原始变量类型的控制方程基于压力、速度和温度,一方面该组变量的选取与 Weiss 等^[6]在构造低速预处理矩阵时的选取保持一致,因此现有的计算平台可以直接采用其发展的预处理方法,并将计算能力扩展到低马赫数问题;另一方面,温度的计算相对于其他变量,尤其针对热化学问题,较为重要也较为困难^[12-14];最后采用速度作为原始变量,对应动量方程,较为直观。在对低速预处理系统的相关研究中,Turkel^[15]指出,预处理后的控制方程尽管对于定常问题满足守恒性质,但是对于非定常问题则不成立,原因是预处理矩阵的引入破坏了时间准确性。然而从数值分析发现,即使不对引入的雅克比矩阵进行低速预处理,基于原始变量的控制方程在离散之后,对于非定常问题也不能得到准确的数值解。数值试验也发现,如果流场光滑,非定常的数值结果误差或许并不明显,但是在梯度较大或者存在强间断时,流场解与准确解相比会出现较大差异。为了消除该数值方法带来的误差,获得准确的非定常解,可以构造相应的双时间步方法,虚拟时间项采用原始变量,而物理时间项采用守恒变量,在相邻的两个物理时间步内作为定常问题求解。尽管虚拟时间推进过程中存在误差,但是方程最终会收敛到物理时间上的守恒形式。计算结果表明,该双时间步方法与守恒变量守恒形式下的双时间步方法计算结果相同,两种方法等价。

1 数值方法

1.1 守恒变量守恒形式控制方程的离散

积分公式(1)可以表示为:

$$\iiint_V \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} dV = \mathbf{R} \quad (4)$$

式中:

$$\mathbf{R} = - \oint_A (\mathbf{F} - \mathbf{F}_d) \cdot \mathbf{n} dA + \iiint_V \mathbf{S} dV \quad (5)$$

\mathbf{R} 为右端项(或者残差项)。对某一个控制单元 i , 右端项在空间上离散,可以表示为:

$$\mathbf{R}_i \approx - \sum_{j \in N} (\mathbf{F} - \mathbf{F}_d) \cdot \mathbf{n}_j A_j + V_{\text{cell}} \mathbf{S} \quad (6)$$

式中, A_j 为单元 i 的第 j 个控制面的面积, \mathbf{n}_j 为该面的法向矢量, N 为单元 i 的控制面总个数, V_{cell} 为单元 i 的体积。不考虑网格的运动,时间项的离散采用一阶向后差分,即

$$\iiint_V \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} dV = \frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \mathbf{Q} dV \approx \frac{\mathbf{Q}_i^{n+1} - \mathbf{Q}_i^n}{t_i^{n+1} - t_i^n} V_{\text{cell}} \quad (7)$$

定义 $\Delta \mathbf{Q}_i^n = \mathbf{Q}_i^{n+1} - \mathbf{Q}_i^n$, $\Delta t_i^n = t_i^{n+1} - t_i^n$, 时间推进采用 Euler 显式格式,方程(1)离散后的线性方程表示为:

$$\frac{V_{\text{cell}}}{\Delta t_i^n} \Delta \mathbf{Q}_i^n = \mathbf{R}_i^n \quad (8)$$

第 $n+1$ 时间步的流场解为:

$$\mathbf{Q}_i^{n+1} = \mathbf{Q}_i^n + \frac{\Delta t_i^n}{V_{\text{cell}}} \mathbf{R}_i^n \quad (9)$$

1.2 原始变量守恒形式控制方程的离散

类似地,积分公式(2)可以表示为:

$$\mathbf{J} \iiint_V \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} dV = \mathbf{R} \quad (10)$$

式中:

$$\mathbf{R} = - \oint_A (\mathbf{F} - \mathbf{F}_d) \cdot \mathbf{n} dA + \iiint_V \mathbf{S} dV \quad (11)$$

即右端项与式(5)相同,该项的空间离散可以采用式(6)表示。不考虑网格的运动,时间项的离散采用一阶向后差分,即

$$\mathbf{J} \iiint_V \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} dV = \mathbf{J} \frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \mathbf{P} dV \approx \mathbf{J}_i^n \frac{\mathbf{P}_i^{n+1} - \mathbf{P}_i^n}{t_i^{n+1} - t_i^n} V_{\text{cell}} \quad (12)$$

特别地,雅克比矩阵 \mathbf{J} 采用第 n 步的原始变量来计算。定义 $\Delta \mathbf{P}_i^n = \mathbf{P}_i^{n+1} - \mathbf{P}_i^n$, $\Delta t_i^n = t_i^{n+1} - t_i^n$, 时间推进采用 Euler 显式格式,方程(2)离散后的线性方程表示为:

$$\mathbf{J}_i^n \frac{V_{\text{cell}}}{\Delta t_i^n} \Delta \mathbf{P}_i^n = \mathbf{R}_i^n \quad (13)$$

第 $n+1$ 时间步的流场解为:

$$\mathbf{P}_i^{n+1} = \mathbf{P}_i^n + \frac{\Delta t_i^n}{V_{\text{cell}}} (\mathbf{J}_i^n)^{-1} \mathbf{R}_i^n \quad (14)$$

1.3 非定常解的时间准确性

Euler 方程(式(3))属于一类非常重要的双

曲守恒律系统^[16],式(9)为与其对应的离散守恒律,可以表述为:控制体 V_{cell} 内的守恒变量在 Δt_i^n 时间的变化,等于穿过所有控制面的净通量。Lax^[17]在对双曲守恒律的研究中指出,通过离散公式(9)求得的数值解天然地满足守恒特性,并能够捕捉间断。因此数值解 Q_i^{n+1} 守恒,并可以作为准确的数值解。另一方面,根据式(14)采用原始变量方法在相同的初值条件下(以原始变量 P_i^n 形式),于时间上推进 Δt_i^n 后,得到新的原始变量数值解 P_i^{n+1} ,直接分析其准确性较为困难,但是可以先将其转换成对应的守恒变量,定义为 \tilde{Q}_i^{n+1} ,则原始变量方法非定常数数值解的准确性可以通过如下方法验证:如果 $\tilde{Q}_i^{n+1} = Q_i^{n+1}$,说明该方法也是一种守恒方法,反之不成立。

不难看出,尽管 $J = \partial Q / \partial P$,但是 $Q \neq JP$,而是 $Q = JP + M$ 。其中:

$$\begin{cases} J = \begin{bmatrix} \frac{1}{RT} & 0 & -\frac{p}{RT^2} \\ \frac{u}{RT} & \frac{p}{RT} & -\frac{pu}{RT^2} \\ \frac{1}{\gamma-1} + \frac{u^2}{2RT} & \frac{pu}{RT} & -\frac{pu^2}{2RT^2} \end{bmatrix} \\ M = \begin{bmatrix} \frac{p}{RT} \\ 0 \\ -\frac{pu^2}{2RT^2} \end{bmatrix} \end{cases} \quad (15)$$

因此原始变量方法得到的守恒变量值为:

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_i^{n+1} &= J_i^{n+1} P_i^{n+1} + M_i^{n+1} \\ &= J_i^{n+1} \left[P_i^n + \frac{\Delta t_i^n}{V_{\text{cell}}} (J_i^n)^{-1} R_i^n \right] + M_i^{n+1} \end{aligned} \quad (16)$$

引入矩阵关系式 $I = (J_i^n)^{-1} (J_i^n)$,式(16)可变形为:

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_i^{n+1} &= J_i^{n+1} (J_i^n)^{-1} \left[J_i^n P_i^n + \frac{\Delta t_i^n}{V_{\text{cell}}} J_i^n (J_i^n)^{-1} R_i^n \right] + M_i^{n+1} \\ &= J_i^{n+1} (J_i^n)^{-1} \left[J_i^n P_i^n + M_i^n - M_i^n + \frac{\Delta t_i^n}{V_{\text{cell}}} R_i^n \right] + M_i^{n+1} \\ &= J_i^{n+1} (J_i^n)^{-1} \left[Q_i^n + \frac{\Delta t_i^n}{V_{\text{cell}}} R_i^n - M_i^n \right] + M_i^{n+1} \end{aligned} \quad (17)$$

需要指出的是,给定相同的初值条件(以 P_i^n 或者 Q_i^n 形式),不论采用原始变量方法还是守恒变量方法,右端项 R_i^n 的值相同。应用式(9),式(17)最终可以表示为:

$$\tilde{Q}_i^{n+1} = J_i^{n+1} (J_i^n)^{-1} Q_i^n + [M_i^{n+1} - J_i^{n+1} (J_i^n)^{-1} M_i^n] \quad (18)$$

该式即为通过原始变量方法得到的守恒变量

\tilde{Q}_i^{n+1} 与准确值 Q_i^{n+1} 的关系式。可以看出两者之间存在一个系数矩阵关系,并加上一个余向量,该系数矩阵与余向量的元素并不是常系数,而是受当地流场状态的影响,可能随时间变化:如果当地流场处于非定常状态,该关系式也表现出非定常的性质;如果流场处于定常状态,则有 $J_i^{n+1} (J_i^n)^{-1} = J_i^{n+1} (J_i^{n+1})^{-1} = I, M_i^{n+1} = M_i^n$,因此 $\tilde{Q}_i^{n+1} = Q_i^{n+1}$,此时采用原始变量方法与守恒变量方法得到的数值解相同。进一步地,比较式(8)与式(13),可以看出给定相同的初值条件,由于右端项的求解方法可以完全相同,原始变量方法产生误差的根本原因是时间项。而对于定常问题而言,流场收敛后,式(8)与式(13)最终都退化为 $R \approx 0$,时间项的影响可以忽略不计,两种方法的数值结果相同。数值应用也表明这一点,Zhang等^[11]和Li等^[18]将原始变量守恒方法分别应用到定常的热化学非平衡问题与湍流问题,得到了与守恒变量方法一致的结果。

1.4 基于原始变量的双时间步方程

从式(18)可以看出,单纯采用原始变量方法,其非定常解 \tilde{Q}_i^{n+1} 与 Q_i^{n+1} 不一定相等,为了使该方法获得准确的非定常数数值解,可以构造相应的双时间步方程:

$$J \iiint_V \frac{\partial P}{\partial \tau} dV + \iiint_V \frac{\partial Q}{\partial t} dV + \oint_A (F - F_d) \cdot n dA = \iiint_V S dV \quad (19)$$

双时间步方法最早由 Jameson^[19] 提出,其主要用来消除时间隐式算法中各种近似处理造成的非定常流动的时间精度损失,本文则主要用来消除原始变量方法本身造成的非定常解误差。式(19)中, τ 为虚拟时间, t 为物理时间,双时间步方法的思想是在冻结物理时间点上引入虚拟时间进行迭代,并通过增加内迭代过程,提高损失的时间精度。可以看出,当式(19)在虚拟时间趋于无穷大时,意味着 $J \iiint_V \frac{\partial P}{\partial \tau} dV = 0$,可以认为双时间步方程收敛到方程(1),即该条件下的双时间步方程与方程(1)等价。

对式(19)进行一阶显式离散,得:

$$J_i^m \frac{V_{\text{cell}}}{\Delta \tau_i^m} \Delta P_i^m + \frac{V_{\text{cell}}}{\Delta t_i^n} (Q_i^{n+1} - Q_i^n) = R_i^m \quad (20)$$

式中: $\Delta P_i^m = P_i^{m+1} - P_i^m, \Delta \tau_i^m = \tau_i^{m+1} - \tau_i^m, \Delta t_i^n = t_i^{n+1} - t_i^n$,上标 m 和 n 分别表示虚拟时间步和物理时间步。虚拟时间的内迭代初值条件为 P_i^n ,当 $m \rightarrow \infty$,收敛的流场变量满足 $P_i^{m+1} \rightarrow P_i^{n+1}$,即

$$\begin{cases} P_i^0 = P_i^n \\ \vdots \\ P_i^{m+1} = P_i^{n+1} \end{cases} \quad (21)$$

式(20)中的 Q_i^{n+1} 未知, 可以用 Q_i^{m+1} 替换, 线性方程整理后为:

$$J_i^m \frac{V_{cell}}{\Delta \tau_i^m} \Delta P_i^m = R_i^m - \frac{V_{cell}}{\Delta t_i^n} (Q_i^{m+1} - Q_i^m + Q_i^m - Q_i^n) \quad (22)$$

应用近似关系式

$$Q_i^{m+1} - Q_i^m \approx J_i^m (P_i^{m+1} - P_i^m) \quad (23)$$

双时间步方程的线性方程组最终表示为:

$$\left(\frac{V_{cell}}{\Delta \tau_i^m} + \frac{V_{cell}}{\Delta t_i^n} \right) J_i^m \Delta P_i^m = R_i^m - \frac{V_{cell}}{\Delta t_i^n} (Q_i^m - Q_i^n) \quad (24)$$

2 激波管问题与结果分析

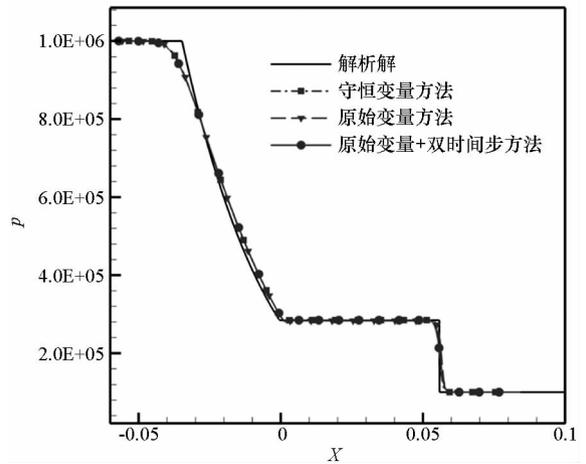
非定常流动算例采用典型的一维激波管问题, 其初值条件见表 1。驱动段与非驱动段的分隔位置位于 $x = 0$, 气体常数 $R = 287.06$, 比热比 $\gamma = 1.4$, 各个物理量均进行无量纲化处理。

表 1 激波管问题初值条件

Tab. 1 Initial conditions of the shock-tube problem

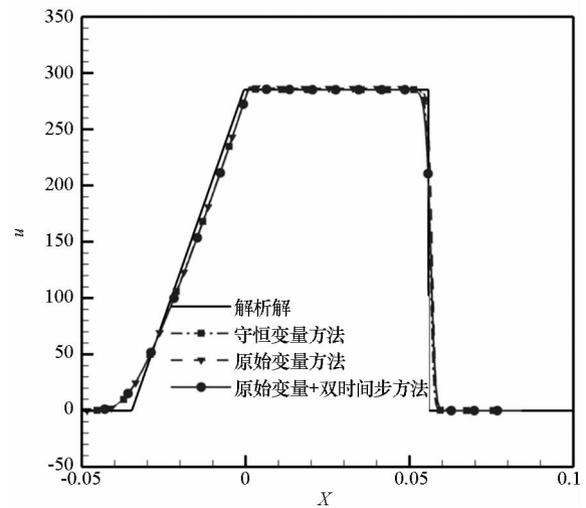
变量	驱动段	被驱动段
密度	11.61	1.161
压力	1.0×10^6	1.0×10^5
温度	300	300

计算采用中山大学计算流体力学研究中心开发的非结构网格计算平台 MulPhy。针对激波管问题, 该求解器只求解 Euler 方程, 采用 Median-Dual 格点格式离散控制体, 通量格式采用 AUSM⁺-up^[20], 控制方程可以采用原始变量或者守恒变量作为自变量, 时间推进采用一阶显式格式, 线性求解器使用 GMRES^[21] 方法。计算网格为二维, 网格数量为 600×20 , 分别对应 x 与 y 方向, 且数值实验表明, 该网格尺度下空间上的数值误差与时间上的数值误差相比, 可以忽略不计。时间推进的步长为 $\Delta t = 1 \times 10^{-7}$, 总共推进 1000 个时间步, 对应物理时间 $t = 1 \times 10^{-4}$ 。双时间步计算中, 每两物理时间步之间的收敛残差降到初始残差的 10 个量级以下。图 1(a) ~ (c) 分别是压力、速度、温度的计算结果。在每张图中, 四组计算结果分别对应解析解, 守恒变量方法(式(9))数值解, 原始变量方法(式(14))数值解, 原始变量 + 双时间步



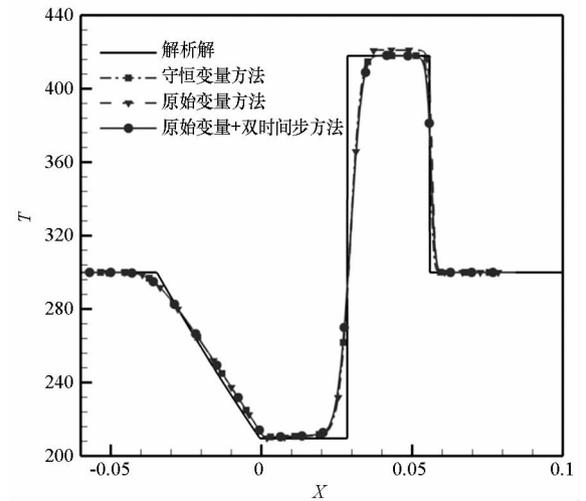
(a) 压力曲线

(a) Pressure curve



(b) 速度曲线

(b) Velocity curve

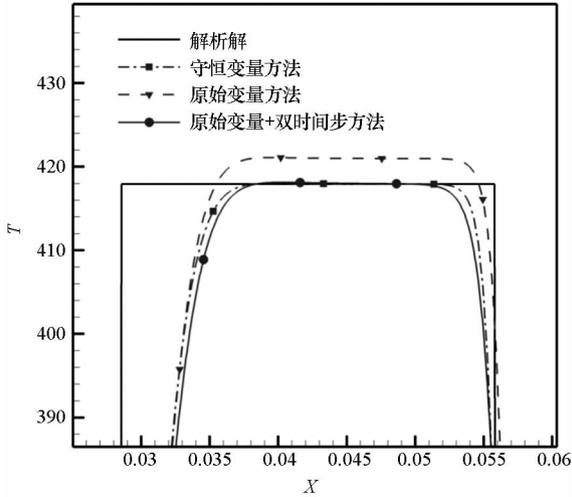


(c) 温度曲线

(c) Temperature curve

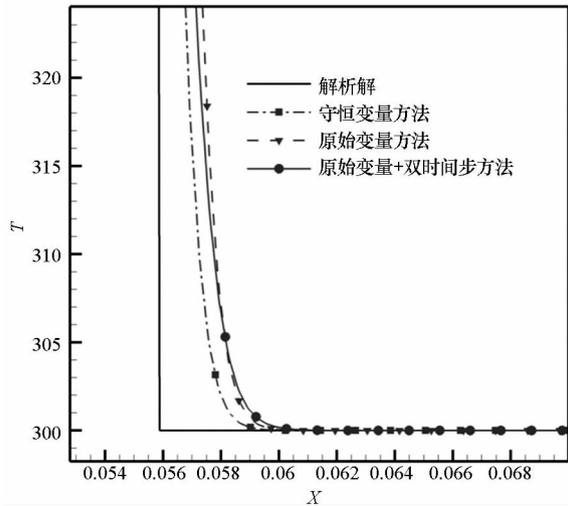
图 1 三种数值解与解析解的原始变量对比
Fig. 1 Comparison of the primitive variables using three numerical approaches against analytical solution

方法(式(24))数值解。从结果对比中可以看出,采用原始变量方法与守恒变量方法得到的压力和速度曲线略有差别,但差别不大,而温度曲线差别较为明显。特别地,在激波间断附近,原始变量方法会产生较大误差。从图 1(c)可以看出,激波后的温度出现明显的上冲,而采用守恒变量方法得到的数值解与解析解保持一致。图 2 为温度对比放大图,由图 2 可以看出,激波的预测位置,也出现了偏差。进一步研究表明,随着时间的继续推进,激波位置的误差会继续增大。



(a) 激波与接触间断附近

(a) In the vicinity of the shock and contact discontinuity



(b) 激波附近

(b) In the vicinity of the shock

图 2 三种数值解与解析解的温度对比放大图

Fig. 2 Contrast magnification of the temperatures using three numerical approaches against analytical solution

将守恒变量方法的数值解作为准确解,计算原始变量方法数值解的误差范数,结果见表 2。其中相对误差范数的参考量采用驱动段的初值条件,由于初速度为零,涉及速度的参考量均采用驱

动段的初始声速 $a = 347.3$ 。可以看出,采用原始变量方法,各个原始变量 (p, u, T) 与各个守恒变量 ($\rho, \rho u, \rho E$) 均有不同程度的误差。

表 2 激波管问题数值结果的误差范数统计

Tab. 2 Norm error statistics of the numerical solutions from primitive variable-based approach compared against conservative variable-based approach

变量	驱动段	L2 范数	最大范数	L2 范数百分比/%	最大范数百分比/%
p	1.0×10^6	1.0×10^5	4.9×10^4	10.3	4.9
u		161	75	46.4	21.6
T	300	78	35	26.0	11.7
ρ	11.6	0.7	0.3	6.0	2.6
ρu		372	174	9.2	4.3
ρE	2.5×10^6	3.1×10^5	1.5×10^5	12.4	6.0

引入双时间步方法(式(24)),数值解(以温度为例)恢复到解析解的水平,但是统计误差范数仍然可以发现,其与守恒变量方法得到的数值解仍然存在较大误差,从图 2 中也可以看出对应的两条曲线并不重合。需要说明的是,通过式(24)计算得到的收敛解满足 $P_i^m = P_i^{m+1}$,而 $P_i^{m+1} \rightarrow P_i^{n+1}$,因此实际上右端项 $R_i^{m+1} \rightarrow R_i^{n+1}$,即双时间步方程的收敛解应该等价于方程

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n + \frac{\Delta t_i^n}{V_{\text{cell}}} R_i^{n+1} \quad (25)$$

的解。

因此将守恒变量方程(1)引入双时间步方法并增加一组数值解,对两组采用双时间步方法的数值解进行比较,温度曲线如图 3 所示,可以看出两曲线完全重合;再次对各个流场变量的误差范数进行统计,L2 范数都在 1.0×10^{-10} 以下,表明两种方法等价。

3 双马赫反射问题与结果分析

为进一步验证基于原始变量的双时间步方法能够恢复准确的数值解,对 Woodward 等^[22] 首先提出的双马赫反射问题进行计算。双马赫反射问题的初始条件和边界条件如图 4 所示,初始时刻, $Ma = 10$ 的激波与平板呈 60° ,并向平板方向运动,激波与平板壁面相交产生激波反射过程。运动激波前后的气体状态分别为:

$$\begin{bmatrix} \rho \\ u \\ v \\ p \end{bmatrix}_B = \begin{bmatrix} 1.4 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \rho \\ u \\ v \\ p \end{bmatrix}_A = \begin{bmatrix} 8 \\ 8.25 \cos \frac{\pi}{6} \\ -8.25 \sin \frac{\pi}{6} \\ 116.5 \end{bmatrix}$$

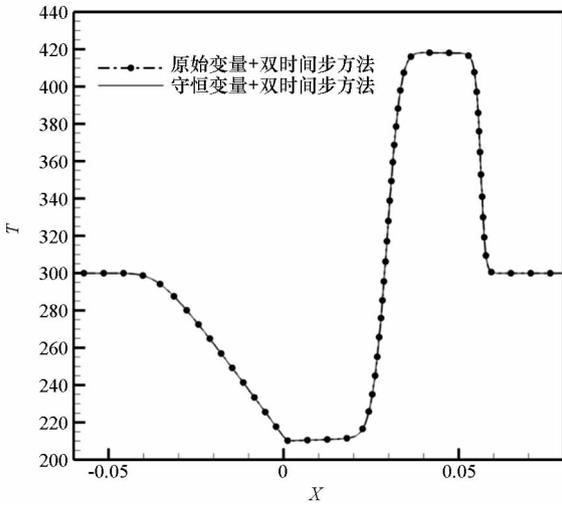


图 3 基于原始变量的双时间步方法与基于守恒变量的双时间步方法的温度计算结果对比

Fig. 3 Comparison of the temperatures predicted by primitive-variable based and conservative-variable based approaches both together with dual-time stepping technique

其中： u 为 x 方向速度， v 为 y 方向速度。

二维计算域为 $[0, 4] \times [0, 1]$ ，采用均匀网格，网格量为 1921×480 ，分别对应 x 与 y 方向，网格收敛性试验表明，该网格尺度满足空间精度要求。时间推进的物理时间步长为 $\Delta t = 4 \times 10^{-5}$ ，总共推进 5000 个时间步，对应物理时间 $t = 0.2$ 。双时间步计算中采用定虚拟时间步 $\Delta \tau = 4 \times 10^{-5}$ ，并发现每两物理时间步之间迭代 20 个虚拟时间步后结果即已经收敛，实际计算采用 30 个虚拟时间步。通量格式采用 AUSMPW + [23]。

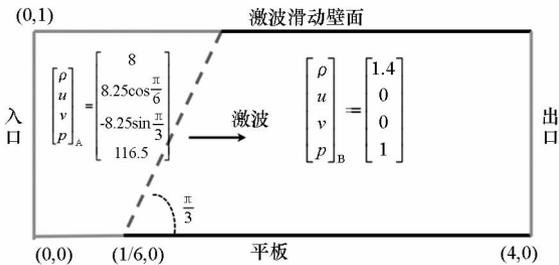


图 4 双马赫反射问题的初始条件和边界条件

Fig. 4 Initial and boundary conditions of double Mach reflection

数值计算首先采用基于原始变量的双时间步方法(式(24))，得到 $t = 0.2$ 时流场的密度云图，如图 5 所示(图中 30 条等势线表示的密度范围为 2 ~ 22)。可以看出，随着时间推进，流场演化出丰富的流动现象，数值方法能够清晰地捕捉到马赫反射后形成的三叉点、入射激波、马赫杆、反射激波和接触间断以及近壁面结构。



图 5 双马赫反射问题 $t = 0.2$ 时密度云图

Fig. 5 Density contours at $t = 0.2$ for the double Mach reflection

作为对比，采用基于守恒变量方程(1)的双时间步方法重新计算，得到另一组数值解，然后对两组数值解的密度变量进行误差范数统计，L2 范数值为 8.14×10^{-12} ，表明尽管该问题物理现象非常复杂，两种方法的计算结果仍然相等，证明两种双时间步方法等价。

4 结论

1) 将守恒变量守恒形式控制方程的时间项引入原始变量作为自变量，非定常数值解无法保证时间准确性。

2) 针对性地构造基于原始变量的双时间步方法，能够恢复准确的数值解，该方法等价于基于守恒变量的双时间步方法。

3) 通过一维激波管问题与双马赫反射的数值实验，上述两个结论均得到验证。基于原始变量的双时间步方法可以推广到一般的非定常流动问题中。

参考文献 (References)

[1] 程彬, 李大力, 徐传福, 等. 面向高阶精度 CFD 的 JFNK 算法及其并行计算[J]. 计算机科学与探索, 2017, 11(1): 61-69.
CHENG Bin, LI Dali, XU Chuanfu, et al. Research on Jacobian-Free Newton-Krylov method for high-order CFD applications and its parallel computing [J]. Journal of Frontiers of Computer Science and Technology, 2017, 11(1): 61-69. (in Chinese)

[2] 王运涛, 王光学, 张玉伦. TRIP2.0 软件的确认: DPW II 复杂组合体的数值模拟[J]. 航空学报, 2008, 29(1): 34-40.
WANG Yuntao, WANG Guangxue, ZHANG Yulun. Validation of TRIP2.0: numerical simulation of DPW II complex configuration [J]. Acta Aeronautica et Astronautica Sinica, 2008, 29(1): 34-40. (in Chinese)

[3] Li X L, Fu D X, Ma Y W, et al. Development of high accuracy CFD software Hoam-OpenCFD [J]. e-Science Technology & Application, 2010(1): 53-59.

[4] Diskin B, Thomas J, Rumsey C L, et al. Grid convergence for turbulent flows (invited) [C]//Proceedings of 53rd AIAA Aerospace Sciences Meeting, 2015: AIAA 2015-1746.

[5] Jasak H. OpenFOAM: open source CFD in research and industry [J]. International Journal of Naval Architecture &

- Ocean Engineering, 2009, 1(2): 89–94.
- [6] Weiss J M, Smith W A. Preconditioning applied to variable and constant density flows [J]. AIAA Journal, 1995, 33(11): 2050–2057.
- [7] Shuen J S, Chen K H, Choi Y. A coupled implicit method for chemical non-equilibrium flows at all speeds [J]. Journal of Computational Physics, 1993, 106(2): 306–318.
- [8] 邓小刚, 刘昕, 毛枚良, 等. 高精度加权紧致非线性格式的研究进展 [J]. 力学进展, 2007, 37(3): 417–427.
DENG Xiaogang, LIU Xin, MAO Meiliang, et al. Advances in high-order accurate weighted compact nonlinear schemes [J]. Advances in Mechanics, 2007, 37(3): 417–427. (in Chinese)
- [9] Palmer G E, Wright M J. Comparison of methods to compute high-temperature gas viscosity [J]. Journal of Thermophysics & Heat Transfer, 2011, 17(2): 232–239.
- [10] 刘巍. 计算空气动力学并行编程基础 [M]. 北京: 国防工业出版社, 2013.
LIU Wei. Foundations of computational aerodynamics parallel programming [M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2013. (in Chinese)
- [11] Zhang H B. High temperature flow solver for aerothermodynamics problems [D]. Guangzhou: Sun Yat-Sen University, 2015.
- [12] 葛明明, 曾明, 赵小宇. 加权紧致非线性格式在热化学非平衡流数值模拟中的应用 [J]. 国防科技大学学报, 2016, 38(5): 163–169.
GE Mingming, ZENG Ming, ZHAO Xiaoyu. Applications of high-order weighted compact nonlinear scheme for thermochemical nonequilibrium flow [J]. Journal of National University of Defense Technology, 2016, 38(5): 163–169. (in Chinese)
- [13] 徐丹, 曾明, 张威, 等. 采用态-态模型的热化学非平衡喷管流数值研究 [J]. 计算物理, 2014, 31(5): 531–538.
XU Dan, ZENG Ming, ZHANG Wei, et al. Numerical study of thermochemical nonequilibrium nozzle flow in state-to-state model [J]. Chinese Journal of Computational Physics, 2014, 31(5): 531–538. (in Chinese)
- [14] 曾明. 高焓风洞流场测量的数值重建和非平衡效应的数值分析 [D]. 北京: 中国科学院力学研究所, 2007.
ZENG Ming. Numerical rebuilding of free stream measurement and analysis of nonequilibrium effects in high enthalpy tunnel [D]. Beijing: Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, 2007. (in Chinese)
- [15] Turkel E. Preconditioned methods for solving the incompressible and low speed compressible equations [J]. Journal of Computational Physics, 1987, 72(2): 277–298.
- [16] Leveque R J. Numerical methods for conservation laws [J]. Mathematics of Computation, 1992, 57(196): 506–507.
- [17] Lax P D. Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation [J]. Communications on Pure & Applied Mathematics, 1954, 7(1): 159–193.
- [18] Li Z Y, Zhang H B, Bailey S C C, et al. A data-driven adaptive Reynolds-averaged Navier-Stokes $k-\omega$ model for turbulent flow [J]. Journal of Computational Physics, 2017, 345: 111–131.
- [19] Jameson A. Application of dual time stepping to fully implicit Runge Kutta schemes for unsteady flow calculations [C]// Proceedings of 22nd AIAA Computational Fluid Dynamics Conference, 2015; AIAA 2015–2753.
- [20] Liou M S. A sequel to AUSM, part II: AUSM⁺-up for all speeds [J]. Journal of Computational Physics, 2006, 214(1): 137–170.
- [21] Saad Y. A flexible inner-outer preconditioned GMRES algorithm [J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 1993, 14(2): 461–469.
- [22] Woodward P, Colella P. The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks [J]. Journal of Computational Physics, 1984, 54(1): 115–173.
- [23] Kim K H, Kim C, Rho O-H. Methods for the accurate computations of hypersonic flows; I. AUSMPW⁺ scheme [J]. Journal of Computational Physics, 2001, 174(1): 38–80.