

文章编号: 0258-0926(2014)01-0005-05

对角隐式龙格库塔法在求解瞬态对流扩散方程中的应用

邓志红^{1,2}, 孙玉良¹, 李 富¹, Rizwan-uddin³

1. 清华大学核能与新能源技术研究院, 北京, 100084;

2. 华能核电开发有限公司, 北京, 100036; 3. 美国伊利诺伊大学香槟分校, 厄巴纳, 61801, USA

摘要: 开发高效求解瞬态对流扩散方程的方法, 其空间离散采用改进的节块展开方法 (MNEM), 时间离散分别选取 2 阶和 4 阶精度的对角隐式龙格库塔 (DIRK) 方法。数值实验结果表明, 程序的计算结果同解析解符合很好; MNEM 具有跟踪强烈温度变化的能力; 两种时间离散方法的效率与问题以及选取的误差限值相关。

关键词: 改进的节块展开法; 对流扩散方程; 对角隐式龙格库塔

中图分类号: O24 **文献标志码:** A

0 引言

目前, 节块法求解对流扩散方程已取得一定进展, 其中主要有节块积分方法 (NIM) 和改进的节块展开方法 (MNEM)。其中, MNEM 不仅保持了节块展开法的高效求解框架, 还改善了传统节块展开法 (NEM) 求解对流扩散方程的稳定性。为配合节块法求解瞬态问题, 在反应堆物理问题中, 先后有刚性限制法、二次误差测度 (QEM)、广义龙格库塔方法和对角隐式龙格库塔方法 (DIRK) 等时间离散方法被采用。而在求解瞬态对流扩散方程时, 选择稳定的时间离散格式是非常必要的。DIRK 是一种分级隐式方法, 不仅具有隐式计算的稳定性, 且极大简化了隐式龙格库塔方法的计算过程, 其实现过程可以等价于多级的向后差分过程, 无需广义龙格库塔法时间变量的雅可比矩阵。综合考虑计算精度和求解效率, 本文在采用 MNEM 空间离散对流扩散方程的基础上, 采用 DIRK 对时间项进行离散近似, 并研究其处理对流扩散问题的效率和精度, 实现了瞬态多维对流扩散方程的高效求解。

1 基本方程

瞬态三维对流扩散方程为:

$$\rho c_p \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T(x, y, z, t)}{\partial x^2} + \lambda \frac{\partial^2 T(x, y, z, t)}{\partial y^2} + \lambda \frac{\partial^2 T(x, y, z, t)}{\partial z^2} - \rho c_p u \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial x} - \rho c_p v \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial y} - \rho c_p w \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial z} + S(x, y, z, t) \quad (1)$$

式中, T 为温度; ρ 为密度; c_p 为定压比热容; λ 为导热系数; u, v, w 分别为 x, y, z 方向的速度; S 为源项。

与求解中子扩散方程类似, NEM 求解对流扩散方程的一般过程为: 首先采用横向积分技术将多维的偏微分方程转化为多个一维的常微分方程; 对节块内各方向的温度采用基函数进行展开, 利用 Galerkin 剩余权重法得到 3 个矩方程; 利用节块边界处的连续条件 (偏温度连续和偏温度梯度连续) 最终得到关于边界偏温度的离散方程; 利用平衡方程求解节块的平均温度。

利用节块法求解对流扩散方程时, 计算区域将首先被划分为方形节块, 节块 k 的定义域为:

$$x \in [-a_{xk}, a_{xk}], y \in [-a_{yk}, a_{yk}], z \in [-a_{zk}, a_{zk}]$$

由于直角几何下 3 个方向类似, 文中以 x 方向进行说明。 x 方向的横向积分方程为:

收稿日期: 2012-10-08; 修回日期: 2013-10-22

基金项目: 国家重大科技专项经费资助项目 (ZX06901)

$$\rho_k c_{pk} \frac{\partial T_{xk}(x,t)}{\partial t} - \lambda_k \frac{\partial^2 T_{xk}(x,t)}{\partial x^2} + \rho_k c_{pk} u_k \frac{\partial T_{xk}(x,t)}{\partial x} = S_{xk}(x,t) - L_{xk}(x,t) \quad (2)$$

式中, T_{xk} 和 S_{xk} 分别为横向积分后的温度 (偏温度) 和源项; L_{xk} 为节块 k 在 x 方向的横向泄漏。

1.1 应用对角隐式龙格库塔方法进行时间处理

求解瞬态对流扩散方程, 首先需要的时间项进行处理。本文将主要采用 2 种强 S-稳定的 DIRK 方法——2 级 2 阶精度的 2S-Dirk 和 5 级 4 阶精度的 5S-Dirk。2 种 DIRK 的龙格库塔矩阵形式如图 1。DIRK 的实现过程可等价于多级的向后差分。

对于问题 $\dot{y} = f(t, y)$, 应用 n 级的 DIRK 进行离散求解, 其计算过程为^[1]:

$$y_i = \tilde{y}_{0,i} + \tilde{h}_i \cdot f(t_0 + c_i \Delta t, y_i), i = 1, \dots, n \quad (3)$$

$$\tilde{h}_i = \Delta t \times a_{ii}$$

$$\tilde{y}_{0,i} = y_0 + \Delta t \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} f(t_0 + c_j \Delta t, y_j)$$

式中, a_{ij} 和 c_j 分别为龙格库塔矩阵中矩阵 A 和向量 c 的元素。

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline b^T & \begin{array}{c} \gamma \\ 1 \quad 1-\gamma \quad \gamma \\ 1-\gamma \quad \gamma \\ \gamma = 1 - \sqrt{2}/2 \end{array} \end{array}$$

a 2S-Dirk

1/4	1/4				
3/4	1/2	1/4			
11/20	17/50	-1/25	1/4		
1/2	371/1360	-137/2720	15/544	1/4	
1	25/24	-49/48	125/16	-85/16	1/4
	25/24	-49/48	125/16	-85/16	1/4

b 5S-Dirk

图 1 DIRK 方法的龙格库塔矩阵形式

Fig. 1 Runge-Kutta Matrix of DIRK

1.2 应用 MNEM 进行空间处理

对时间项进行离散之后, 瞬态方程可被等价于稳态方程来处理。对流扩散方程与中子扩散方程不同, 其解可能剧烈变化, 尤其当对流占优时。由于对流扩散方程的解剧烈振荡, 传统方法 (如中心差分方法) 在求解该方程时会遇到稳定性问题, 需要选取非常细的网格来避免数值振荡, 极

大限制了其计算效率。节块法求解对流扩散方程的核心问题就是稳定性。为了改善传统节块法求解对流扩散方程的稳定性, 文献[2]中 MNEM 采用速度的指数函数代替原来第四阶多项式作为展开函数, 数值实验表明该方法具有很好的稳定性。

节块的 x 方向的偏温度 T_{xk} 展开如下:

$$T_{xk}(x) = a_{x0k} + \sum_{n=1}^4 a_{xnk} f_{nk}(x) \quad (n = 1, 2, 3, 4) \quad (4)$$

式中, a_{xnk} 为节块 k 在 x 方向的展开系数; f_{xnk} 为展开函数。在 MNEM 中, 代替传统节块法中第四阶展开多项式的指数函数为:

$$f_{4x}(x) = \frac{1}{\beta_{xk}} [R_{xk} a_{xk} \exp(R_{xk} x) - \sinh(R_{xk} a_{xk})] \quad (5)$$

式中, $\beta_{xk} = R_{xk} a_{xk} \exp(R_{xk} a_{xk}) - \sinh(R_{xk} a_{xk})$, $R_{xk} = \rho_k c_{pk} u_k / \lambda_k$ 。该指数函数满足:

$$\frac{1}{2a_{xk}} \int_{-a_{xk}}^{a_{xk}} f_{4x}(x) dx = 0 \quad (6)$$

$$f_{4x}(x = -a_{xk}) = \frac{1}{\beta_{xk}^k} [R_{xk} a_{xk} \exp(-R_{xk} a_{xk}) - \sinh(R_{xk} a_{xk})] \quad (7-1)$$

$$f_{4x}(x = a_{xk}) = 1 \quad (7-2)$$

节块边界处的偏温度和偏温度梯度为:

$$T_{kx+} = T_{xk}(x = a_{xk}) = a_{x0k} + \frac{a_{x1k}}{2} + \frac{a_{x2k}}{2} + a_{x4k} \quad (8)$$

$$T_{kx-} = T_{xk}(x = -a_{xk}) = a_{x0k} - \frac{a_{x1k}}{2} + \frac{a_{x2k}}{2} + \frac{R_{xk} a_{xk} \exp(-R_{xk} a_{xk}) - \sinh(R_{xk} a_{xk})}{R_{xk} a_{xk} \exp(R_{xk} a_{xk}) - \sinh(R_{xk} a_{xk})} a_{x4k} \quad (9)$$

$$\frac{dT}{dx} \Big|_{x=-a_{xk}} = \frac{a_{x1k}}{2a_{xk}} - \frac{3a_{x2k}}{2a_{xk}} + \frac{3a_{x3k}}{4a_{xk}} + R_{xk} B \quad (10)$$

$$B = \frac{R_{xk} a_{xk} \exp(R_{xk} a_{xk})}{R_{xk} a_{xk} \exp(R_{xk} a_{xk}) - \sinh(R_{xk} a_{xk})} a_{x4k}$$

$$\frac{dT}{dx} \Big|_{x=a_{xk}} = \frac{1}{2a_{xk}} a_{x1k} + \frac{3}{2a_{xk}} a_{x2k} + \frac{3}{4a_{xk}} a_{x3k} + B \quad (11)$$

在 MNEM 中, 源项采用二阶多项式展开。由于对流扩散方程的解变化剧烈, 传统 NEM 中基于相邻节块的横向泄漏形状相同且为二阶多项式的假设已不再成立。若在求解对流扩散方程时仍

然采用这种近似方法，可能由于简单近似带来的数值振荡（尤其当对流占优时）影响方法的整体计算精度。因此，本文仅对横向泄漏进行 0 阶近似，后续工作将进一步研究横向泄漏的合理近似。MNEM 的具体实现过程不再赘述^[2]。

2 数值结果和分析

基于时间、空间离散推导，开发求解瞬态对流扩散方程的程序 TDMNEM。通过对几个典型的瞬态对流扩散问题的求解，一方面研究 MNEM 求解对流扩散方程的能力，另一方面比较 2S-DIRK 和 5S-DIRK 方法处理时间项的精度和效率。为了说明精度，文中误差均采用均方差 (RMS) 表示。所有算例中参数均为归一化参数。

2.1 一维瞬态问题

2.1.1 固定边界问题 首先计算一维瞬态对流扩散问题，其边界温度恒定。方程为^[3,4]：

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 T(x,t)}{C\partial x^2} - \frac{u(x,t)\partial T(x,t)}{\partial x}, (-2 \leq x \leq 2) \quad (12)$$

其初始条件和边界条件为：

$$T(-2,t) = 1, (t \geq 0); T(2,t) = 1, (t \geq 0);$$

$$T(x,0) = 1, (t < 0); T(x,0) = 0, (t < 0)$$

当 C 和 u 恒定时，可以得到该问题的解析解：

$$T(x,t) = 0.5 - \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \sin\left[(2k-1)\frac{\pi(x-ut)}{L}\right] \times \frac{\exp\left[-(2k-1)^2\pi^2t/(CL^2)\right]}{(2k-1)} \quad (13)$$

在该问题中， C 越大，温度梯度越大。

图 2 给出了计算区域划分为不同节块数目时，MNEM 的数值解与解析解的比较。其中，时

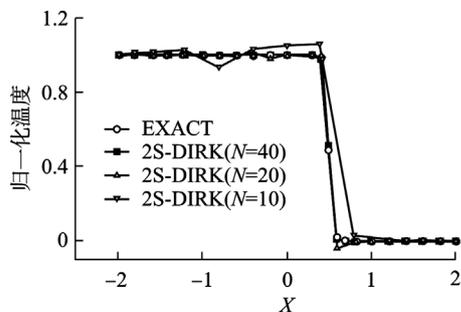


图 2 MNEM 数值解同解析解的比较
Fig. 2 Comparison between Numerical Solutions of MNEM and Analytical Solution
 $C=1000, t=1.0, u=5.0, \Delta t=0.01$

间项均采用 2S-DIRK 方法离散。为了尽量减少时间离散误差对结果的影响，选择小的时间步长 $\Delta t=0.01$ 。如图 2 所示，当节块数 $N=10$ 时，MNEM 数值解在温度阶跃变化附近有一定的振荡；该振荡是由于 $C=1000$ 时，温度变化近似阶跃，数值解为了满足温度梯度的变化引起多项式部分的振荡。到 $N=20$ 时，振荡已经变得非常小，其 RMS 为 1.35×10^{-2} 。 $N=40$ 时，振荡基本消失，与解析解符合得非常好，其 RMS 为 2.80×10^{-3} 。表征 MNEM 具有良好的跟踪剧烈温度变化的能力。

为了比较 2S-DIRK 和 5S-DIRK 两种方法的精度和效率，图 3 给出了 $t=1.0, u=0.5, \Delta x=0.1, C=1000$ 时，数值解同解析解的对比情况。图 3 表明 2S-DIRK 和 5S-DIRK 均具有较好的计算能力；当选取相同的时间步长时，如预期一致，5S-DIRK 的精度比 2S-DIRK 的精度高。

图 4 给出了 2 种方法的 RMS 随时间步长的变化情况。图 4 中，两种方法的 RMS 随时间步长的变化率近似为二阶和 2 阶，表征了程序实施的正确性；在本算例计算时选择何种方法进行时间离散需要综合考虑精度需求和计算效率。当选取目

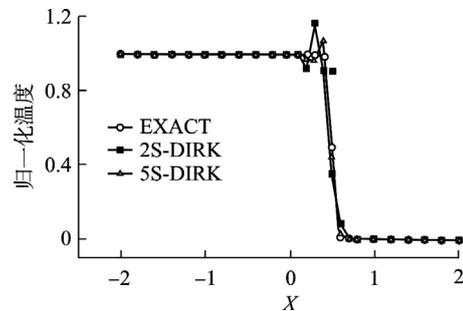


图 3 2S-DIRK 和 5S-DIRK 的数值解比较
Fig. 3 Numerical Solution Comparison between 2S-DIRK and 5S-DIRK
 $C=1000, t=1.0, u=0.5, \Delta x=0.1, \Delta t=0.2$

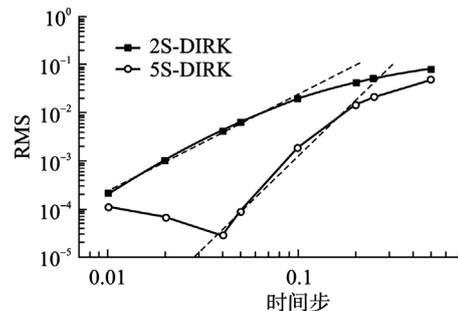


图 4 2S-DIRK 和 5S-DIRK 的 RMS 误差变化情况
Fig. 4 RMS Errors of 2S-DIRK and 5S-DIRK
 $C=1000, t=1.0, u=0.5, \Delta x=0.4$

标 RMS 为 1% ,达到此精度的 5S-DIRK 时间步长约为 2S-DIRK 时间步长的 2.7 倍,即在相同精度条件下选择 5S-DIRK 和 2S-DIRK 效率基本相当;若选定目标 RMS 为 0.1% ,此时,5S-DIRK 的时间步长为 2S-DIRK 时间步长的 5 倍,其整体计算效率约为 2S-DIRK 的 2 倍,效率优势明显。

2.1.2 时变边界问题 该算例的左侧边界温度随时间变化,方程与式(12)相似,其计算区域为 $x \in [0,2]$,初始条件和边界条件分别为^[3,4]:

$$T(x,0) = 0 \quad \text{for } 0 < x \leq 2$$

$$T(0,t) = e^{-\lambda t} \quad \text{for } t \geq 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} T(x,t) = 0 \quad \text{as } x \rightarrow \infty$$

该问题左边界的值在 0 时刻从 0 跳变为 1,之后以指数形式衰减。其解析解为:

$$T(x,t) = 0.5e^{-\lambda t} \left[\exp\left(\frac{(u-\sigma)x}{2\alpha}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x-\sigma}{2\sqrt{\alpha t}}\right) + \exp\left(\frac{(u+\sigma)x}{2\alpha}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x+\sigma}{2\sqrt{\alpha t}}\right) \right] \quad (14)$$

式中, $\sigma = \sqrt{u^2 - 4\lambda/C}$ 。

图 5 为不同时刻、不同时间步长下 2S-DIRK 和 5S-DIRK 的数值解同解析解的比较情况。当时间步长选取较大时 ($\Delta t = 0.2$),2S-DIRK 的数值解明显偏离解析解,且存在一定的数值振荡,而 5S-DIRK 与解析解符合很好 (RMS 为 7.54×10^{-3});当减小时间步长,2S-DIRK 的误差随之减小,数值振荡基本消失 (RMS 为 1.11×10^{-2})。

算例 2 2S-DIRK 和 5S-DIRK 的 RMS 随时间步长的变化情况表明,2 种方法均具有很好的收敛特性,对数图中的斜率与其理论精度阶数符合

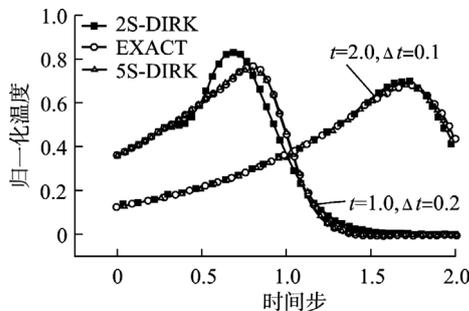


图 5 2S-DIRK 和 5S-DIRK 的数值解比较

Fig. 5 Numerical Solution Comparison between 2S-DIRK and 5S-DIRK
 $C=100, t=1.0, \Delta x=0.04$

得很好;与算例 1 的结果类似,当选取 RMS 误差限为 1% 时,二者效率基本相当,当选取 RMS 误差限为 0.1% 时,5S-DIRK 才能体现其效率优势,其效率约为 2S-DIRK 的 2 倍。

2.2 二维瞬态问题

为了比较 2S-DIRK 和 5S-DIRK 2 种方法在计算多维瞬态对流扩散方程时的精度,计算一个二维瞬态问题,方程为:

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \lambda \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + v_x \frac{\partial T}{\partial x} + v_y \frac{\partial T}{\partial y} = S(x,y) \quad (15)$$

$-2 \leq x \leq 2, -2 \leq y \leq 2$ 条件下,其解为^[5]:

$$T(x,y,t) = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh\left(\frac{x}{\lambda}\right) \right] \left[\frac{1}{2} - \frac{y}{4} \right] \left[-1 + 2e^{-t} \right] \quad (16)$$

代入式(15)中,可得源项表达式为:

$$S(x,y) = \frac{-e^{-t}}{8\lambda} \left\{ \lambda (v_x e^{-t} - 2v_y + 2y - 4) \times \left[\tanh\left(\frac{x}{\lambda}\right) - 1 \right] + \lambda A \right\} \quad (17)$$

$$A = (e^{-t} - 2)(y - 2) \left[\cosh^2\left(\frac{x}{\lambda}\right) \right]^{-1} \left[v_x + 2 \tanh\left(\frac{x}{\lambda}\right) \right]$$

选取 $v_x = 1, v_y = 1$,为了增加求解的难度,选取导热系数 $\lambda = 0.01$,即对流换热能力远大于导热能力,温度变化剧烈。 $t=2.0$ 、时间步长为 0.2 时 2S-DIRK 和 5S-DIRK (节块划分为 80×80) 的温度场基本相似,与解析解符合得很好;但此时 5S-DIRK 的 RMS 仅比 2S-DIRK 的计算误差略小,因此其效率不如 2S-DIRK。

3 结束语

研究了瞬态对流扩散方程的高效求解方法,其中采用 MNEM 处理空间变量,采用 DIRK 离散时间项。2S-DIRK 和 5S-DIRK 均为隐式稳定性算法,分别具有 2 阶和 4 阶精度,并且其实现过程分布可以等效为 2 级和 5 级向后差分过程。本文针对一系列的瞬态对流扩散问题进行了数值验证,计算结果表明,TDMNEM 程序的计算结果同解析解符合得很好;MNEM 具有跟踪剧烈温度变化的能力;时间离散算法的有效选择需要根据问题和误差限值确定。

参考文献：

- [1] 赵文博. 瞬态节块格林函数方法及其与热工-水力耦合研究[D]. 清华大学博士学位论文, 2012.
- [2] Deng Z H, Rizwan-uddin, Li F, et.al. Modified Nodal Expansion Method for the Convection-Diffusion Equation[C]. Nuclear Reactor Thermal-hydraulic, Pisa, Italy, 2013.
- [3] Rizwan-uddin. A Second-Order Space and Time Nodal Method for the One-Dimensional Convection-Diffusion Equation[J]. Computers & Fluids, 1997, 26: 233-247.
- [4] Martinus Th, Van Genuchten. Analytical Solutions for Chemical Transport with Simultaneous Adsorption, Zero-Order Production and First-Order Decay[J]. Journal of Hydrology, 1981, 49: 213-233.
- [5] Toreja A J. A Nodal Approach to Arbitrary Geometries, and Adaptive Mesh Refinement for the Nodal Method[D]. PhD Thesis, University of Illinois, Urbana, IL, 2002.

Application of Diagonally Implicit Runge-Kutta Method for Solving Time-Dependent Convection-Diffusion Equation

Deng Zhihong^{1,2}, Sun Yuliang¹, Li Fu¹, Rizwan-uddin³

1. Institute of Nuclear and New Energy Technology, Tsinghua University, Beijing, 100084, China;

2. China Huaneng Nuclear Development Co. Ltd. Beijing, 100036, China;

3. Nuclear, Plasma, Radiological Engineering, University of Illinois at Urbana-Champaign, Urbana, 61801, USA

Abstract: An efficient scheme for solving transient convection-diffusion equation was developed. Modified nodal expansion method (MNEM) was utilized for spatial discretization, while two kinds of diagonally implicit Runge-Kutta (DIRK) schemes—second-order DIRK and fourth-order DIRK were adopted for time discretization. The numerical results show that the numerical results of TDMNEM code agree with analytical solutions very well. MNEM has good ability in capturing sharp temperature variation. The efficiency of two time discretization methods depend on problem and the error criteria which been selected.

Key words: Modified nodal expansion method, Convection-diffusion equation, Diagonally implicit Runge-Kutta schemes

作者简介：

邓志红（1984—），男，2013年毕业于清华大学核科学与技术专业，获博士学位。现从事反应堆物理、热工计算相关研究工作。

孙玉良（1962—），男，研究员，博士生导师。1992年毕业于德国亚琛工业大学核科学与技术专业，获博士学位。现从事核能科学与工程的教学和科研工作。

李富（1968—），男，研究员，博士生导师。1995年毕业于清华大学核科学与技术专业，获博士学位。现主要从事高温气冷堆物理设计、安全分析。

（责任编辑：黄可东）