计算传热学的近代进展

第五章 数值解的误差分析

主讲 陶文铨

西安交通大学能源与动力工程学院
热流中心 CFD-NHT-EHT CENTER

2018年5月16日，西安

第五章目录

5.1 数值解误差的分类及计算结果的考核

5.1.1 数值解误差的分类

5.1.2 国际学术界对数值误差分析的要求

5.1.3 数值方法与数值模拟结果的考核

5.1 数值解误差的分类及计算结果的考核

5.1.1 数值解误差的分类

A. 物理现象

建模误差

（1）控制方程正确否?

（2）边界条件正确否?

（3）物性参数正确否?

（4）源项正确否?

B.建立物理数学模型

离散误差

（1）截断误差，取决于格式；

（2）边界条件处理方法；

（3）网格分布特性；

（4）与时间有关项的离散

C. 方程与边界条件的离散

计算误差
（1）舍入误差；
（2）不完全迭代误差；

D. 数值计算结果

离散误差是构成数值解误差的主要部分。

5.1.2 国际学术界对数值解误差分析的要求

1986年ASME J Fluids Engineering公布了对数值解的要求，1993年进一步确认，2008年又进一步强调；1993年归纳的十大政策主要为：

1. 必须说明离散格式的截断误差的阶数；

2. 空间导数的离散格式至少是二阶的；

3. 必须确认所提供的是网格无关解；

4. FUD，HD，PLS，EPS均被认为是一阶格式 。

建议:调试程序时用FUD或者PLS， 正式计算用CD，SGSD，或者3 阶对称格式。

5.1.3 数值方法与数值模拟结果的考核

考核内容包括:

（1）数值解的网格独立性；

（2）与基准解的比较；

（3）离散格式精度等级分析；

（4）误差估计 。

5.1.4 Validation and verification---V & V

国际上最早提出对数值模拟结果进行Validation及Verification 要求始于1979年，以后美国的IEEE，AIAA及ASME都提出了自己的要求，即使如此，对这两个英语词汇的解释还是众说纷纭，有研究者认为:Validation是指计算模型正确与否的验证，而Verification 是指数值方法处理合适与否的确认；

但是实际上有时难以明确区别，因此后来人们就不再予以区分而笼统称为 V&V。

2010年剑桥大学出版社出版了长达760余页的专著《Verification and Validation in Scientific Computing》(W.L.Oberkampf and C.J.Roy）。

近年来ASME每年举行一次V & V 国际会议，2013年起在ASME期刊系里中创建了V& V 子刊。

但是目前国际上关于数值模拟结果不确定度的分析还没有得出学术界普遍接受的方法与具体实施技术，本章讨论内容参考美国ASME的一些主要思想及我们自己的 体会。

5.1.5 数值误差与数值不确定度

数值误差(Numerical error)指分析得出的数值及其正负符号都有很大的可信度的 (known with a high reliability)；如果分析得出的数值只具有一定的可信度（常常95%）应该称为数值不确定度（Numerical uncertainty）。

本章的分析方法大部分应该属于数值误差的分析方法。

5.2 基准解

5.2.1 不同类型的分析解

5.2.2 高精度的数值解

5.2.3 可靠和完整的实验结果

5.2 基准解

基准解(Benchmark solution)包括以下三种：

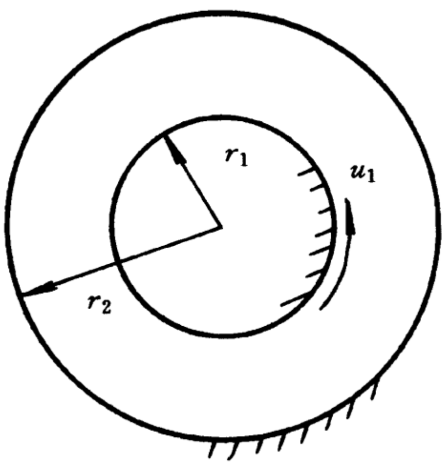
5.2.1 不同类型的分析解

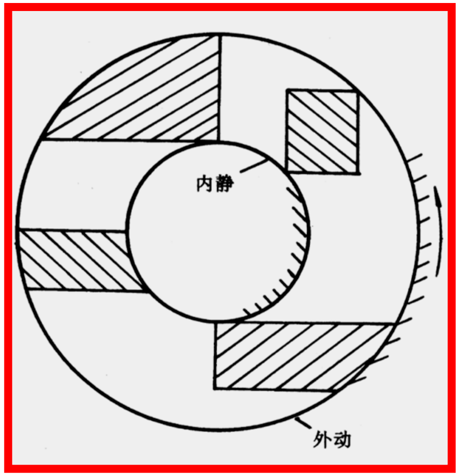
1. 严格数学意义上的分析解

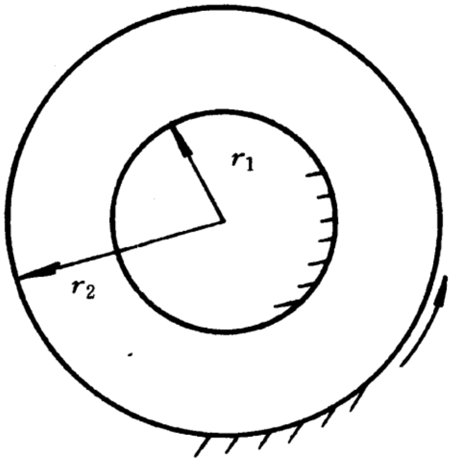
既满足微分方程又满足边界条件的数学表达式，数量极其有限。

$$\frac{u}{u_1}=\frac{r_1/r_2}{1-(r_1/r_2)^2}\bullet\frac{1-(r/r_2)^2}{r/r_2}$$

$$\frac{u}{u_2}=\frac{r_1/r_2}{1-(r_1/r_2)^2}\bullet[\frac{r/r_2}{r_1/r_2}-\frac{r_1/r_2}{r\ /r_2}]$$







2. 只满足微分方程不满足边界条件的分析解

2D，3D不可压缩NS方程的分析解：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \mathrm{Re}\,\vec{u} \bullet \nabla \vec{u} = -\mathrm{Re}\nabla p + \nabla^2 \vec{u} \\ \nabla \bullet \vec{u} = 0 \end{cases}$$

2D不可压之解

$$\begin{cases} u = -\cos(\pi x)\sin(\pi y)e^{-2\pi^2 \nu t} \\ v = \cos(\pi y)\sin(\pi x)e^{-2\pi^2 \nu t} \\ p = -\dfrac{\cos(2\pi x) + \cos(2\pi y)}{4} e^{-4\pi^2 \nu t} \end{cases}$$

Ethier C R, Steimman D A. Exact fully 3D Navier-Stokes solution for benchmarking. Int J Numer Methods Fluids, 1994, 19(5): 369-376

3. 蔡睿贤院士的代数显式分析解（教材340页）；

4. 对于存在源项的对流-扩散方程，任意选定的连续函数均可作为分析解：将该函数代入到该方程所产生的不等于零的部分记作为源项。

$$\frac{\partial T}{\partial t}=a\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\quad (0\le x\le L)$$

设

$$T=T_0 e^{t/t_0}\sin(\pi x/L) \tag{a}$$

代入上式得

$$\frac{\partial T}{\partial t}-a\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}=[\frac{1}{t_0}+a(\frac{\pi}{L})^2]T_0\sin(\pi x/L)e^{t/t_0}$$

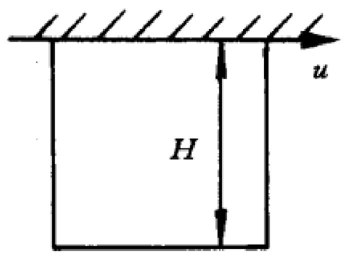
$$\begin{cases} \dfrac{\partial T}{\partial t} - a\dfrac{\partial^2 T}{\partial x^2} = S \quad (0 \le x \le L) \\ S = [\dfrac{1}{t_0} + a(\dfrac{\pi}{L})^2]T_0 \sin(\pi x / L) e^{t/t_0} \end{cases} \quad \text{(b)}$$

故式(a) 是式(b)的分析解。

构筑此类分析解的意义：可以构建计算区域的边界条件，用于考核数值计算的结果：对于规定的计算区域，以上述分析解计算该区域边界上的速度与压力，作为边界条件，让被考核的程序在此边界条件下计算域内的流场，将计算结果与分析解作比较。

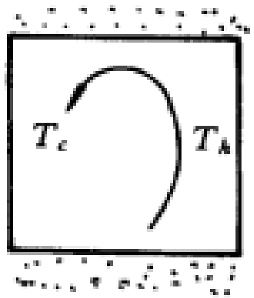
5.2.2 高精度的数值解

最著名的是1982年Ghia等的顶盖驱动流的计算结果。

No	物理问题及图示	参数范围	数值方法	文献
1	二维方腔顶盖驱动流 	$Re=uH/\nu$ $Re=10^2\sim10^4$	涡量-流函数法及多重网格方法，$Re=10^4$ 时最密网格为 257×257	[35]

U. Ghia, K.N. Ghia and C.T. Shin. High-Re Solution for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method. J. Comput. Phys., 1982, 48:387-411.

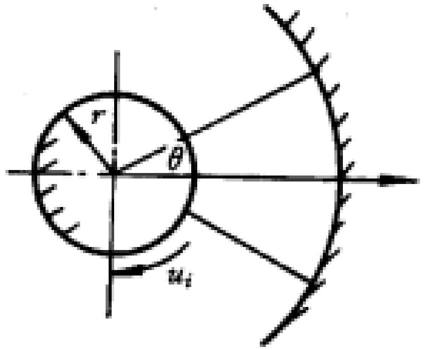
E. Ertuk, T.C. Corke and C. Gokcol. Numerical Solutions of 2-D Steady Incompressible Driven Cavity Flow at High Reynolds Numbers, Int. J. Numer. Meth. Fluids, 2005, .48:747-774

No	物理问题及图示	参数范围	数值方法	文献
2	二维方腔自然对流 	Pr≈0.7 Ra=10^3~10^{10}	涡量-流函数法([36]),假拟谱方法([38]), 128×128;原始变量法、k-ε 模型,壁面函数法[39], 80×80[41], 低 Re 的 k-ε 模型[40]	[36]~[41]

De Vahl Davis G. Natural convection of air in a square cavity, a benchmark numerical solution. **Int J Numerical Methods in Fluids**, 1983, 3:249-264

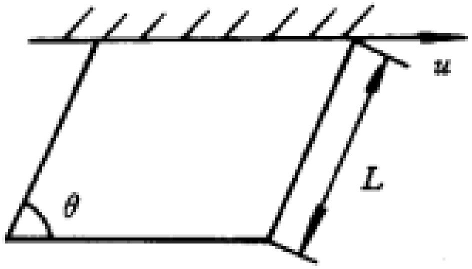
Barakos G, Mitsoulis E. Natural convection flow in a square cavity revisited, laminar and turbulent models with wall functions. **Int J Numerical Methods in Fluids**, 1994, 18:695-719

D.C. Wan, B.S.V. Patnaik and G.W. Wei. A new benchmark quality solution for the buoyancy-driven cavity by discrete singular convolution. Numer. Heat Transfer B. 2001,Vol.40, pp.199-228

No	物理问题及图示	参数范围	数值方法	文献
3	二维环腔顶盖驱动流 	$Re=u_i r/\nu$ $Re=60\sim350$ $2\theta=1$ 弧度	涡量-流函数法，多重网格[42]，128×128，估计误差 0.1%～1%；原始变量法，自适应网格[43]	[42] [43]

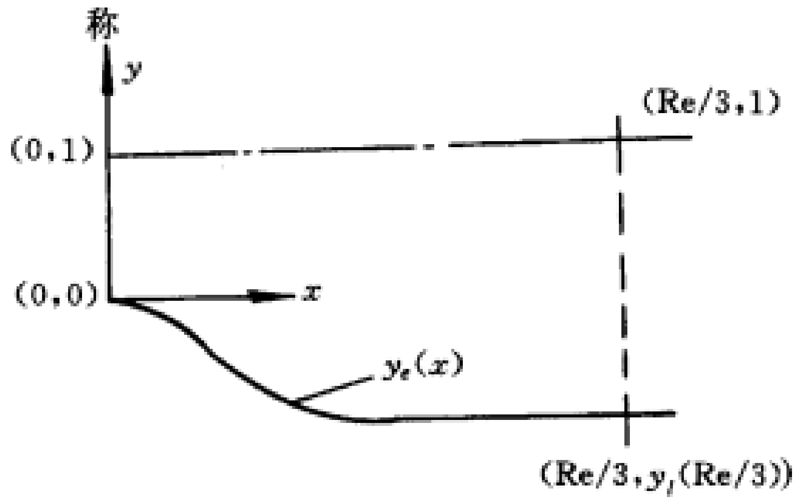
Fuchs L, Tillmark N. Numerical and experimental study of driven flow in a polar cavity. Int J Numerical Methods in Fluids , 1985, 5:311-329

Lee D, Tsuei Y M. A hybrid adaptive gridding procedure for recirculating flow problems. J Comput Phys. 1993, 108:122-141

No	物理问题及图示	参数范围	数值方法	文献
4	二维倾斜空腔顶盖驱动流 	$Re=\frac{uL}{\nu}$ Re=100,1000 $\beta=30°,45°$	适体坐标方法，多重网格，速度与压力的耦合采用对称的多重线迭代法 256 × 256[44]；适体坐标，同位网格 SIMPLE 方法[45]	[44] [45]

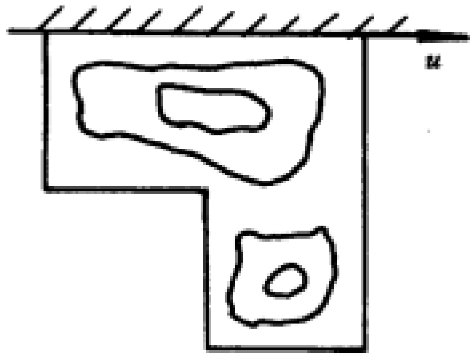
Demirdzic I, Lilek Z, Peric M. Fluid flow and heat transfer test problems for non-orthogonal grids ,benchmark solutions. Int J Numerical Methods in Fluids , 1992,15:339-354

Oosterlee CW ,Wesseling P, Segal A. Bechmark solutions for the incompressible Navier-Stokes equations in general coordinate on staggered grids. Int J Numerical Methods in Fluids , 1993,17:301-321

No	物理问题及图示	参数范围	数值方法	文献
5	二维对称断扩通道中的层流流动 	$y_t=[\tanh(2-30\frac{x}{Re})-\tanh(2)]/2$ 入口流速分布 $u=3(y-y^2/2)$ $v=0, Re\doteq10,100$	采用涡量-流函数方法或原始变量法，21×21网格	[46]

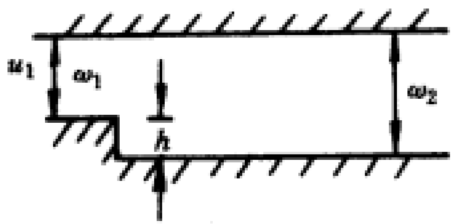
网格数目只有21X21，太少。

Napolitano M, Orlandi P. Laminar flow in a complex geometry – a comparison. Int J Numerical Methods in Fluids , 1985,5:667-683

No	物理问题及图示	参数范围	数值方法	文献
6	二维 L 型腔中的顶盖驱动流 	Re=100,1000	适体坐标法(用双调和方程生成网格),最密网格 256×256	[44]

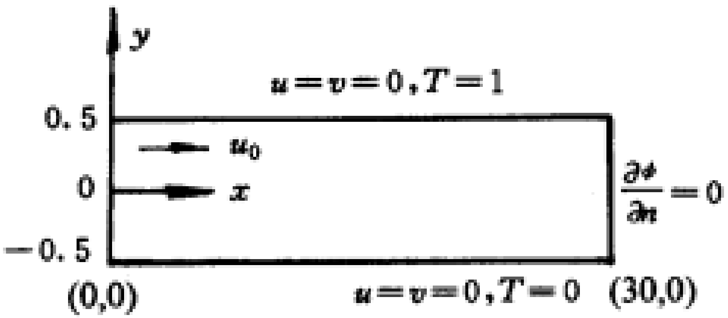
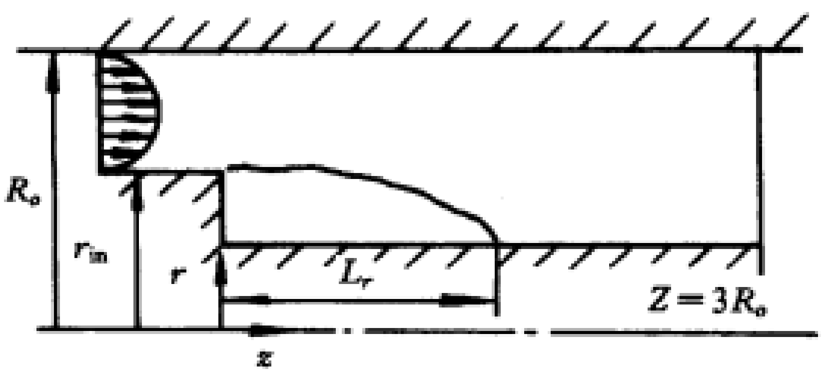
建议可用块结构化网格，原始变量法求解。

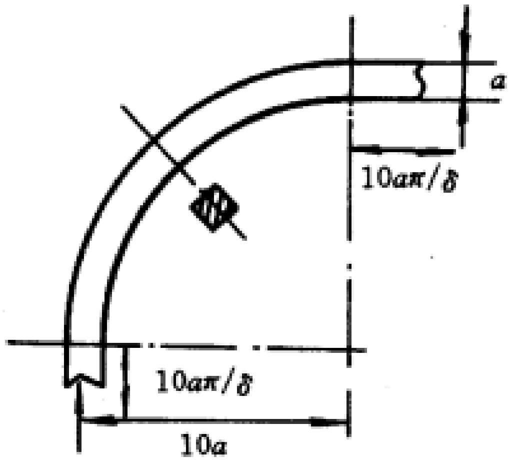
Oosterlee CW ,Wesseling P, Segal A. Bechmark solutions for the incompressible Navier-Stokes equations in general coordinate on staggered grids. Int J Numerical Methods in Fluids , 1993,17:301-321

No	物理问题及图示	参数范围	数值方法	文献
7	后台阶流动与换热 	$Re=u_1h/\nu=10, 20,$ 50,100,200,500 $w_2/w_1=1.25\sim2$ $Pr=10^{-4}\sim10^3$[47] $Re=800$[48]	原始变量法，压力用 Poisson 方程求解，但该方程中保留膨胀项*，60×40 网格[47]，ψ-ω 方法，有限元方法，Re=800 流动是稳定的[48]	[47] [48] [49]

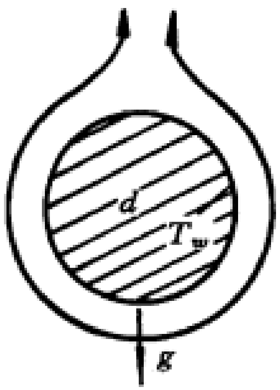
对于此类突扩流动，当Re数大于一定数值后，流动会出现分叉，表现为重接触点位置周期性的变化。

Gresho P M. Is the steady viscous incompressible two-dimensional flow over a backward-facing at Re=800 stable? Int J Numerical Methods in Fluids , 1993,17:501-541

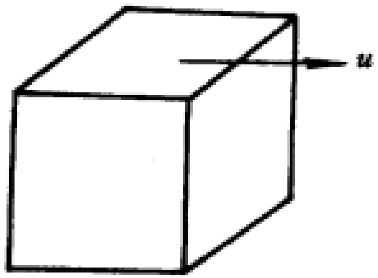
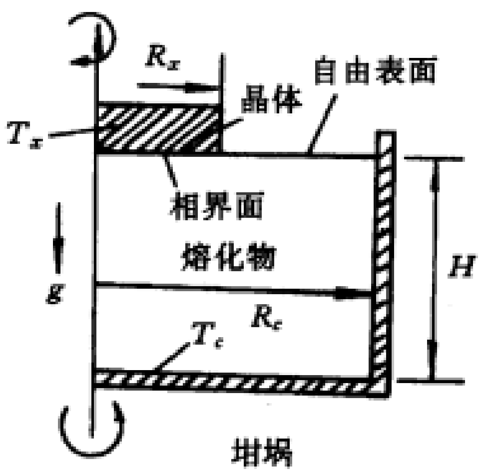
No	物理问题及图示	参数范围	数值方法	文献
8	后台阶分层流动(stratified flow)  	$Pr=1$, $Re=u_0H/\nu=800$ $Gr=3.6\times10^5$ H 为通道高度	有限元法，原始变量法，从非稳态计算到稳态，采用 80 × 480 长方形单元，共 38961 个节点	[50]
9	环状后台阶流  	$r_{in}=0.6R_0$ $Re=\frac{UR_0}{\nu}=100\sim400$ U 为入口最大速度	ψ-ω 方法，四阶配位法(collocation method)	[51]

No	物理问题及图示	参数范围	数值方法	文献
10	方形截面管道 90°弯头的三维层流流动 	$Re=\frac{\rho u_m a}{\nu}=0,100,500$ $De=Re/\sqrt{10}$ 式中 De 为 Dean 数 (Dean number) u_m 为截面平均流速	有限元法 32 (90°弯头区)×16 ×16(截面)	[52]

Hassager O, Henrikson P, Townsend P, Webster M F, Ding D. The quarterbend:a three-dimensional benchmark problem. Compt Fluids, 1991, 20:373-386

No	物理问题及图示	参数范围	数值方法	文献
11	水平圆管外的层流自然对流 	Pr=0.7 Ra=10^3~10^5	计算区域外边界取到2000~20000d，平均Nu准确到三位数字	[53]

Saitoh T, Sajiki T, Maruhara K. Benchmark solution to natural convection heat transfer problem around a horizontal circular cylinder. Int J Heat Mass Transfer, 1993, 36:1251-1259

12	三维顶盖驱动流  	Re=1000,2000,3200 Re=1000 的解各人的结果符合得很好，Re=2000 无基准解，Re=3000 无稳态解	原始变量法，最小二乘方有限元法，60×61×30 平元	[54]
13	Czochralski 晶体成长简化模型的流动  	$Pr=0.05$ $H/R_c=1.0$ $R_x/R_c=0.4$ $Re_x=R_c^2\Omega_x/\nu$ $=0\sim10^4$ $Re_c=R_c^2\Omega_x/\nu$ $=0\sim2.5\times10^{-3}$ $Gr=g\beta(T_c-T_x)R_c^3/\nu^2$ $=0\sim10^6$	有限容积法，对流项用 CD 及延迟修正，SIMPLE 算法，SIP 方法求解代数方程，多重网格法，从 10×10 到 320×320	[55]

5.2.3 可靠而且完全的实验结果

5.3 离散格式截断误差的分析

5.3.1 有限差分法－Taylor展开

5.3.2 有限容积法－Leonard 方式的Taylor展开

5.3.3 有限容积法－Jin方式的Taylor展开

5.3 离散格式截断误差的分析

5.3.1 有限差分法－Taylor展开

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_i = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{\mathrm{mod}el} + (TE)_{FD}$$

$(TE)_{FD}$ 很容易由Taylor展开获得。

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{\mathrm{mod}el} = \begin{cases} \dfrac{\phi_{i+1}-\phi_i}{\Delta x} & (TE)_{FD} = O(\Delta x) \\ \dfrac{\phi_i-\phi_{i-1}}{\Delta x} & (TE)_{FD} = O(\Delta x) \\ \dfrac{\phi_{i+1}-\phi_{i-1}}{2\Delta x} & (TE)_{FD} = O(\Delta x^2) \end{cases}$$

5.3.2 有限容积法－Leonard方式的Taylor展开

将一阶导数的离散表达式看成是一阶导数在该单元中的平均值：

$$\frac{1}{h}\int_{w}^{e}\frac{\partial\phi}{\partial x}dx=\frac{\phi_e-\phi_w}{h}=\frac{(\phi_e-\phi_w)_{\mathrm{model}}}{h}+(TE)_{FV}$$

此式无任何误差

误差从界面值的模型引入

Leonard方式的分析截断误差的方法如下：

Leonard BP. Order of accuracy of QUICK and related convection diffusion schemes. Appl. Math. Modelling,1995, 19:640-653

对CD：

这是中心差分的界面插值模型

$$\frac{\phi_e-\phi_w}{h}=\left[\frac{\left(\frac{\phi_{i+1}+\phi_i}{2}-\frac{\phi_i+\phi_{i-1}}{2}\right)}{h}\right]+(TE)_{\mathrm{FV}}$$

Leonard方式的分析：将 ϕ_{i+1},ϕ_i 对 e 界面作展开，将 ϕ_i,ϕ_{i-1} 对w界面作展开，最后得出

$$(TE)_{CD,L}=-\frac{1}{8}\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3})_i h^2-\frac{1}{128}\frac{\partial^5\phi}{\partial x^5})_i h^4+\ldots\ldots$$

FD方式的分析得:

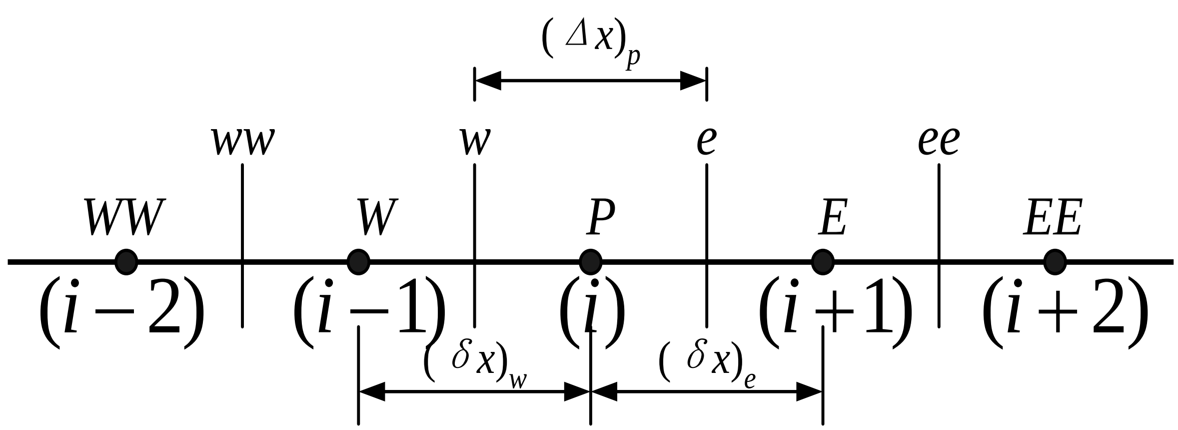
$$(TE)_{CD}=-\frac{1}{6}\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3})_i h^2-\frac{1}{120}\frac{\partial^5\phi}{\partial x^5})_i h^4+\ldots\ldots$$

按Leonard方式的分析得出QUICK为 3 阶格式。

5.3.3 有限容积法—Jin方式的Taylor展开

$$\begin{cases} \phi_e = a_{i-1}\phi_{i-1} + a_i\phi_i + a_{i+1}\phi_{i+1} \\ \phi_w = a_{i-1}\phi_{i-2} + a_i\phi_{i-1} + a_{i+1}\phi_i \end{cases} \quad (1)$$

在 e 和 w 界面上的插值采用相同的一套系数。



在 FVM中对流项在控制容积上的积分导致：

$$\left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_i=\frac{\phi_e-\phi_w}{\Delta x} \qquad (2)$$

将式 (1)的表达式代入:

$$\left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_i=\frac{\phi_e-\phi_w}{\Delta x}=\frac{(a_i-a_{i+1})\phi_i+(a_{i-1}-a_i)\phi_{i-1}+a_{i+1}\phi_{i+1}-a_{i-1}\phi_{i-2}}{\Delta x} \qquad (3)$$

将 $\phi_{i-2},\phi_{i-1},\phi_{i+1}$ 对同一点 i 做Taylor 级数展开

$$\left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_i=\underline{(a_i+a_{i-1}+a_{i+1})}\left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_i+\underline{(-3a_{i-1}-a_i+a_{i+1})}\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_i\cdot\frac{\Delta x}{2!} \qquad (4)$$

$$+\underline{(7a_{i-1}+a_i+a_{i+1})}\left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right|_i\cdot\frac{\Delta x^2}{3!}+O(\Delta x^3)$$

分析解

离散变量的一阶导数，近似解

不计三阶及更高阶截差:

$$\begin{cases} a_{i-1}+a_i+a_{i+1}=1 \\ -3a_{i-1}-a_i+a_{i+1}=0 \\ 7a_{i-1}+a_i+a_{i+1}=0 \end{cases} \longrightarrow a_i=\frac{5}{6}, a_{i-1}=-\frac{1}{6}, a_{i+1}=\frac{1}{3}$$

即得三阶迎风 (TUD) 格式:

$$\begin{cases} \phi_e=-\frac{1}{6}\phi_{i-1}+\frac{5}{6}\phi_i+\frac{1}{3}\phi_{i+1} \\ \phi_w=-\frac{1}{6}\phi_{i-2}+\frac{5}{6}\phi_{i-1}+\frac{1}{3}\phi_i \end{cases} \qquad (5)$$

如果在式 (4)中保留三阶导数项（即二阶阶段误差项），得:

$$\begin{cases} a_{i-1}+a_i+a_{i+1}=1 \\ -3a_{i-1}-a_i+a_{i+1}=0 \\ 7a_{i-1}+a_i+a_{i+1}\neq 0 \end{cases} \Rightarrow \boxed{a_i\neq\frac{5}{6}, a_{i-1}=\frac{1}{4}-\frac{a_i}{2}, a_{i+1}=\frac{3}{4}-\frac{a_i}{2}}$$

由此获得FVM中具有二阶截差格式的一般表达式:

$$\begin{cases} \phi_e=a_i\phi_i+\left(\frac{1}{4}-\frac{a_i}{2}\right)\phi_{i-1}+\left(\frac{3}{4}-\frac{a_i}{2}\right)\phi_{i+1} \\ \phi_w=a_i\phi_{i-1}+\left(\frac{1}{4}-\frac{a_i}{2}\right)\phi_{i-2}+\left(\frac{3}{4}-\frac{a_i}{2}\right)\phi_i \\ a_i\neq\frac{5}{6} \end{cases} \quad (6)$$

$$a_i=3/4 \qquad \phi_e=\frac{3}{8}\phi_{i+1}+\frac{6}{8}\phi_i-\frac{1}{8}\phi_{i-1} \qquad \textbf{(QUICK)}$$

按Jin方式的分析得出QUICK为 2 阶格式。

5.4 Richardson外推法

5.4.1 Richardson外推法基本假设

5.4.2 Richardson外推法的实施

5.4.3 实施Richardson外推法的几点说明

5.4 Richardson 外推法

5.4.1 Richardson外推法的基本假设

1. 数值解单调地收敛;

2. 网格已经足够细密，截断误差中只计首项，更高阶的项可以不计;

3. 舍入误差与不完全迭代误差可以略而不及计。

5.4.2 Richardson外推法的实施

利用三套不同疏密网格上的解，可以推得其精确解的估计值。假设被求变量可以表示为:

$$\boxed{\phi = \phi_{\alpha h} + C(\alpha h)^n}$$

其中：α 网格调节参数；**C, n** 取决于所用格式，***n***为截断误差的阶数。此式中有三个待定 C, n, ϕ 。

如果$\alpha = 1, 2, 4$，即有三套成倍变化的网格上的数值解，则可得出：

$$\left\{\begin{aligned} \phi &= \phi_h + C(h)^n \\ \phi &= \phi_{2h} + C(2h)^n \\ \phi &= \phi_{4h} + C(4h)^n \end{aligned}\right.$$

由此解得：

收敛解的估计值：

$$\phi = \frac{2^n \phi_h - \phi_{2h}}{2^n - 1}$$

截断误差阶数：

$$n = \frac{\ln[(\phi_{2h} - \phi_{4h})/(\phi_h - {}_{2h}\phi)]}{\ln 2}$$

系数：

$$C = \frac{\phi - \phi_h}{h^2}$$

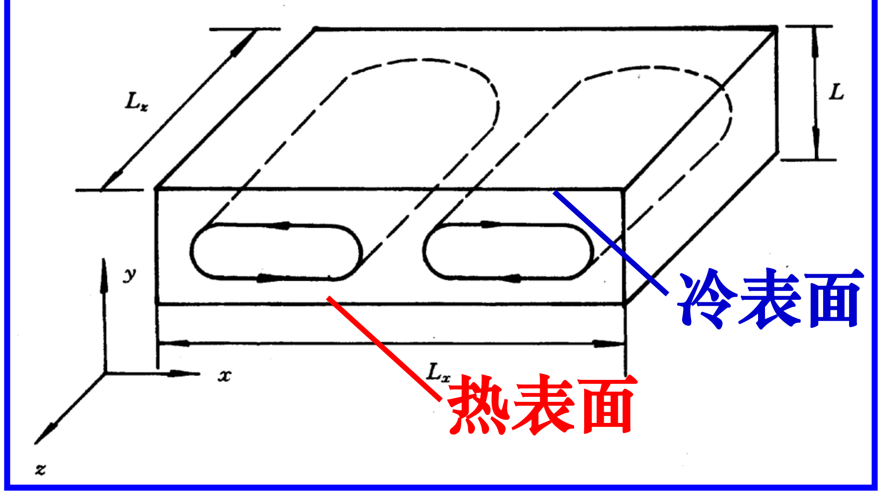
步长为 *h* 的网格上数值解的离散误差：

$$\boxed{\varepsilon_h = \phi - \phi_h = \frac{\phi_h - \phi_{2h}}{2^n - 1}}$$

5.4.3 实施Richardson外推法的几点说明

1. Richardson外推法中被估计的量既可以是场变量，例如速度，温度等，也可以是与整场有关的经过处理的量，例如*Nu*，*f*，这正是该法最引人之处。

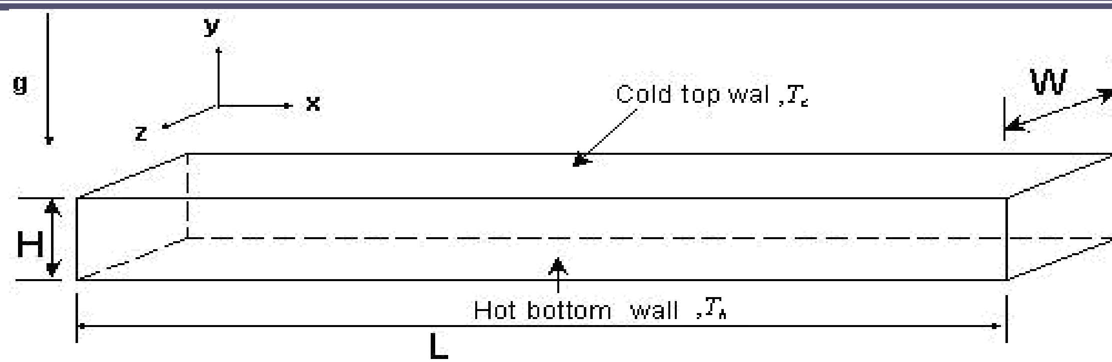
例如K T Yang（杨光祖） 等就用此法估计Benard流动的Nu值：

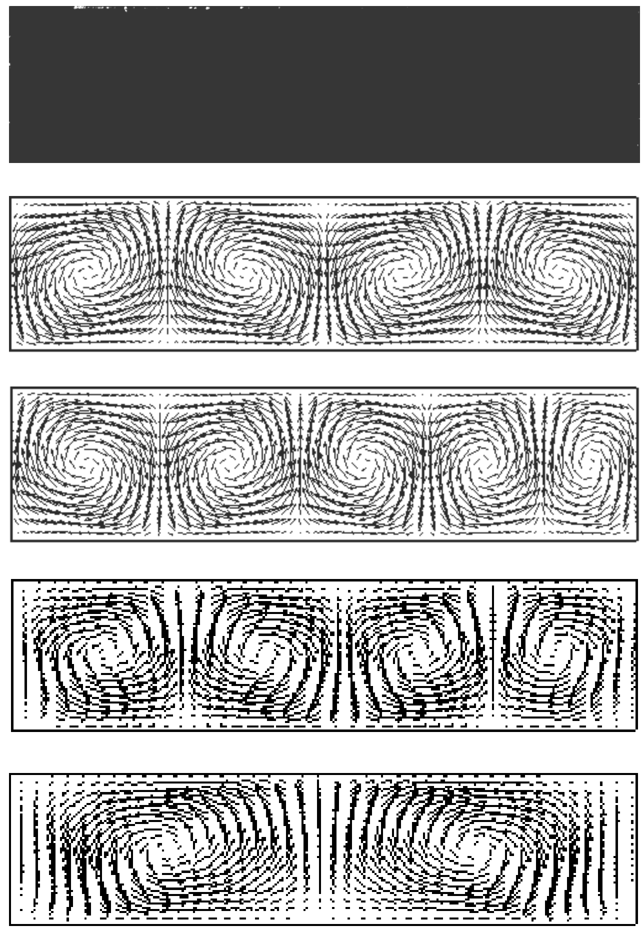


Mukutmoni D,Yang K T. Rayleigh-Benard convection in a small aspect ratio enclosure, Part 1. ASME J Heat Transfer, 1993, 115: 360-366

表 7-9 双涡 Rayleigh-Bernad 流动计算结果的外推

网格	20×20×20	40×40×40	80×80×80	Richardson 外推法	相对偏差(%)
Nu	2.646	2.586	2.571	2.566	3.12
U_{max}	42.75	42.97	43.01	43.02	0.63
x_{max} (U_{max})	0.70	0.61	0.66	0.677	
y_{max} (U_{max})	0.82	0.81	0.81	0.18	
z_{max} (U_{max})	0.47	0.50	0.51	0.513	
V_{max}	46.67	51.05	51.95	52.25	10.38
x_{max} (V_{max})	0.09	0.04	0.02	0.0133	
y_{max} (V_{max})	0.55	0.32	0.52	0.52	
z_{max} (V_{max})	1.0	1.02	1.04	1.048	
W_{max}	7.81	8.13	8.18	8.200	4.72
x_{max} (W_{max})	0.09	0.04	0.02	0.0133	
y_{max} (W_{max})	0.22	0.21	0.21	0.21	
z_{max} (W_{max})	0.315	0.315	0.315	0.315	





(a)

(b)

(c)

(d)

(e)

2. 用Richardson外推法外推场中某点之值时，三套网格上的值应在同一地点，如果需要可以插值，但插值公式的阶数应高于离散格式阶数；

3. 用Richardson外推法外得到的估计值实际上是更高阶截断误差下的解；例如中心差分：外推结果是四阶截差下的结果：

$$(TE)_{FV} = -\cancel{\frac{1}{8}\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3})_i h^2} - \frac{1}{128}\frac{\partial^5\phi}{\partial x^5})_i h^4$$

4. 尽管Richardson外推法有其局限性，但仍然是目前最可靠的获得数值解不确定度的方法。

5.5 网格收敛性指标及迭代不完全误差

5.5.1 网格收敛性指标问题

5.5.2 数值解相对误差的估计计算式

5.5.3 Roache 的网格收敛性指标GCI

5.5.4 不完全迭代误差的估计

5.5 网格收敛性指标及迭代不完全误差

5.5.1 网格收敛性指标问题

实际计算中通过逐渐加密网格来获得网格无关的解。采用不同截断误差的离散格式时，在两套疏密不同网格上得到的解的评价需要有一个统一的方式。如：

方案1：一阶截差格式，网格加密50%，加密前后两个解的偏4%；

方案2：二阶截差格式，网格加密100%，加密前后两个解的偏6%.

问：哪一个密网格的解更可靠（精确）？

5.5.2 数值解相对误差的估计计算式

利用Richardson外推法的基本思想来分析。

设计算中所用离散格式为 p 阶，网格步长为h，数值解为 ϕ_1，分析解为 ϕ_0，则可假设：

$$\phi_1 = \phi_0 + \underline{g_1 h^p} + g_2 h^{p+1} + g_3 h^{p+2} + \ldots\ldots.(1)$$

将网格扩大或缩小 α 倍后，有

$$\phi_2 = \phi_0 + \underline{g_1 (\alpha h)^p} + g_2 (\alpha h)^{p+1} + g_3 (\alpha h)^{p+2} + \ldots\ldots.(2)$$

将 α^p 乘式(1), 再减去式(2)

$$\alpha^p \phi_1 = \alpha^p(\phi_0 + \cancel{g_1 h^p} + g_2 h^{p+1} + g_3 h^{p+2} + \ldots\ldots) \quad (1b)$$

$$\phi_2 = \phi_0 + \cancel{g_1(\alpha h)^p} + g_2(\alpha h)^{p+1} + g_3(\alpha h)^{p+2} + \ldots\ldots (2)$$

由此解出 ϕ_0

$$\phi_0 = \phi_1 + \frac{\phi_1 - \phi_2}{\alpha^p - 1} + O(h^{p+1})$$

假设网格已经足够细密，则余项可以略去，得

$$\boxed{\phi_1 - \phi_0 = \frac{\phi_2 - \phi_1}{\alpha^p - 1}}$$

定义数值解相对误差的估计值为： $E_1 = \dfrac{\phi_1 - \phi_0}{\phi_1}$

将前式代入上式，得：

$$E_1 = \frac{1}{\phi_1}(\phi_1 - \phi_0) = \frac{1}{\phi_1}\frac{\phi_2 - \phi_1}{\alpha^p - 1} \qquad \textbf{(3)}$$

$$E_1 = \left(\frac{\phi_2 - \phi_1}{\phi_1}\right)\frac{1}{\alpha^p - 1} = \frac{\varepsilon}{\alpha^p - 1}$$

ε **为疏密两套网格间的相对偏差，** $\varepsilon = \dfrac{\phi_2 - \phi_1}{\phi_1}$

可见：应该用E_1作为数值解相对偏差的估计值，而

采用 ε 是不够合理的，因为它既未考虑截差阶数也未考虑两套网格之比。**实际上要使两套网格上的解的相对偏差小于某个小数是十分容易的。**

5.5.3 Roache 的网格收敛性指标GCI

GCI---Grid convergence index

$$\mathrm{GCI}_{fine} = 3|\varepsilon| / (\alpha^p - 1) \qquad (4)$$

当 $\alpha = 2, p = 2$ 时 $\mathrm{GCI}_{fine} = |\varepsilon|$

因此上述网格收敛性指标可以看成为：由任意 p 阶，α 倍变化的两套网格所得之解而确定的 ε 折算到同一问题采用二阶截差、两倍网格变化的两套解的相对变化值。

用上述网格收敛性指标来分析本节开始提出的问题：

$$\boxed{\mathrm{GCI}_{fine} = 3|\varepsilon| / (\alpha^{p} - 1)}$$

方案1： p**=1,** $\alpha = 1.5$ **，** GCI=3×4/(1.5-1)=24%

方案2： p**=2,** $\alpha = 2$, GCI=$3\times 6/(2^{2} - 1) = 6\%$

方案 2 的密网格的解要更好一些。

往往经过网格考核后，出于经济性考虑采用了疏网格上的解作为数值解，则网格收敛性指标为：

$$\mathrm{GCI}_{coarse} = \mathrm{GCI}_{fine} \cdot \alpha^{p} \qquad (5)$$

Roache P J. Prospective:A method for uniform reporting of grid refinement studies. ASME J Fluids Engineering, 1994, 116: 405-413

5.5.4 Roache 的网格收敛性指标GCI方法的拓展

1. Eca 与Hoekstra(2002) 提出的如何将分析中的噪音(Noise)过滤掉（filtering）的方法;

Eca L and Hoekstra, An evalation of verification procedures for CFD applications, 24th Symposium on Naval Hydrodynamics, Fukuoka, Japan, July 8-13, 2002

2. Cadafalch 等 (2002) 提出了整体平均法（Global averaging method）；

Cadafalch J, Perrez-Segara C D, Consul R, Oliva A, Verification of finite volume computations on steady-state fluid flow and heat transfer, Journal of Fluids Engineering, 2002, 24:11-21

3. Xing与Stern提出的安全因子方法

上述讨论（Rechardson外推法，GCI收敛性指标）都基于下列假设：

（1）收敛是渐进的，不存在震荡；

（2）数值误差的分析公式中仅保留了级数的第1项：

$$\phi = \phi_{\alpha h} + C(\alpha h)^n$$

如果要保留第2项就会导致很大的计算工作量；

（3）所用到的数值解已经足够接近于真解；外推需要3套这样的解。

Xing Tao（邢涛）与 Stern F 2010年提出了称为安全因子（Factor of safety)的评价方法，可部分地克服这些缺点。

Xing T, Stern F. Factors of safety for Rechardson extrapolation . ASME J Fluids Engineering, 2010， 132, 061403-1 — 061403-13

推荐阅读

目前国际上不少期刊都对数值模拟结果明确提出要有误差分析的要求，而且不断更新，投稿前应该仔细阅读有关期刊的规定；例如ASME J Fluids Engineerig 在2008年提出的分析不确定度的方法可见:

Celik I B, Ghia U, R Roache P J, Freitas C J, Coleman H, Raad P E., Procedure for estimation and reporting of uncertainty due to discretization in CFD applications. ASME J Fluids Engineering, 2008, 130:078001-1 to 078001-4

5.5.5 不完全迭代误差的估计

假设在迭代过程快收敛时，下列矩阵方程中：

$$\phi^{n+1} = \mathbf{H}\phi^{n} + \mathbf{D} \qquad (6)$$

矩阵 $\mathbf{H}, \mathbf{D}$ 已经近似地为常数（线性化假设）。

收敛解与第n次迭代解之间有如下关系：

$$\phi^{n} = \phi_0 + \varepsilon^{n} \qquad (7)$$

代入式（6）得：

$$\underline{\phi_0} + \varepsilon^{n+1} = \underline{\mathbf{H}(\phi_0} + \varepsilon^{n}) + \underline{\mathbf{D}}$$

$$\varepsilon^{n+1} = \mathbf{H}\varepsilon^{n}$$

迭代快收敛时误差矢量是以迭代矩阵H的方式而传递的。

由矩阵理论，第n次迭代的不完全误差：

$$\boxed{\varepsilon^{n}=\frac{\phi^{n+1}-\phi^{n}}{\lambda_1-1}}\qquad \lambda_1\text{为矩阵的谱半径。}\qquad (8)$$

可见：仅以两次迭代的偏差作为收敛依据是不科学的，理论上应以式（8）为判据，但是谱半径的计算费时，一般用余量的范数较为方便与合理；而且每个所求解方程的规整化余量至少下降3-4个数量级。只有迭代不完全误差可以不计的情况，做数值解的离散误差分析才有意义。

关于课程答辩的说明

课程答辩讲解15分钟，提问3分钟，PPT大约在15~20页左右,主要介绍自己的工作，课堂上讲过的内容介绍可从简（或作简单介绍）；同时提供一份纸质的报告和报告的电子版本。

一. 本小组网页上可下载的源程序

1. VOSET 气液两相流二维程序
2. 《数值传热学》教学程序SIMPLER最新版
3. 数值传热学教学程序（SIMPLE）
4. 数值传热学教学程序(SIMPLER)
5. SIMPLER 程序注释版
6. 博士生教学程序(Delaunay.for & unstructured.for)
7. 本课热流问题教学一维程序
8. 涡量流函数法源程序
9. IDEAL程序
10. 单相流动LBM程序
11. 传质LBM程序

二. 对课程论文的要求

1．课程论文应按照西安交大学报（自然科学版）论文的要求撰写，具体要求见西安交大学报每期的封里，但论文的长度可以放宽；凡新的推导力求详细；如计算部分系在教学程序基础上进行的，应附上修改部分的计算源程序及变量表；

2．约在2018-12月-2019年1月间组织课程论文研讨与答辩，具体时间由任兴杰、雷乐两位助教负责通知与安排。

三. 参考论题

西安交通大学能源与动力工程学院研究生课程《计算传热学的近代进展》课程答辩参考论题与论文撰写要求（2018.5.16）

1．用Delaunay方法对两个不规则区域生成非结构化网格，并讨论改变网格疏密的方法；
2．用块结构化网格离散一个不规则区域，并实现其内的层流流动计算；
3．分析对流项的有界性条件，论证它是充要条件还是充分条件，用数值例子说明你的观点；
4．以数个二维问题为例，分析CD、SUD、QUICK以及SGSD格式的稳定性及计算时间；
5. 试采用一种三阶对称绝对稳定的格式计算一个流动问题，并与CD，SUD，QUICK格式比较计算精度，计算时间和稳定性；
6．在结构化网格上实现一种高阶组合格式，对两个对流问题进行求解，与CD格式做稳定性的对比分析；

7．实现PISO算法，用两个二维流动问题比较该算法与SIMPLE，SIMPLEC ,及 SIMPLER的收敛特性；

8．实现SIMPLEX算法，用两个二维问题比较该算法与SIMPLE，SIMPLEC 及 SIMPLER的收敛特性；

9．通过3～5个例题，比较IDEAL，SIMPLE，SIMPLEC的收敛特性与健壮性；

10. 应用外推法对两个有基准解的层流流动问题，获得高精度的数值解，并与基准解比较之。

11. 试用两个计算实例，验证下列说法：计算的正确性主要取决于格式，而收敛的快慢主要取决于算法；

12. 实现你自己在网格生成、对流格式、速度与压力耦合方法、及数值解误差分析方面的新思想，并以算例说明之；

13. 参考本组网页上的VOSET程序，计算一个需要扑捉界面的两相流问题（如气泡上升运动）；

14. 试将二维结构化网格上的VOSET方法拓宽到二维非结构化网格上，计算一个例子；
15. 计算一个与专业有关的复杂流动与传热问题，至少采用本课程中介绍过的一种新方法，计算结果中应有一部分内容在文献中尚未见到报道；
16. 对于计算流体力学与计算传热学在你所从事的技术工作中应用进行文献综述，至少包括20篇国际杂志或国际会议的论文。
17. 参考本组网页上的单相流动LBM程序，模拟二维多孔介质中的流动并计算渗透率。
18. 参考本组网页上的传质LBM程序，模拟二维多孔介质中扩散过程并计算有效扩散系数。

19 耦合LBM流动和传质程序，研究二维平直通道中不同Pe数下的对流扩散问题。

20. 发展本组网页上的传质LBM程序，模拟具有体反应或面反应的传质问题。
21. 采用分子动力学方法模拟顶盖驱动流动。
22. 采用分子动力学方法模拟泊肃叶流动。
23. 采用Materials Studio软件建立质子交换膜的分子动力学计算模型，并计算水和氢离子、水分子等的扩散系数。
24. 采用分子动力学方法计算纳米流体的导热系数。
25. 选择一种或多种所在专业常用金属（Pt除外），采用分子动力学方法研究极性分子在所选金属壁面的界面特性。

四. 对答辩PPT 的建议

1. 每张PPT内容布置要包满；

2. 建议字号：24-28，每页10-15行字；

3. 内容要图文并茂；可动的图画更好；PPT内容的出现可分前后次序；

4. 每页有页码；

5. 文字要直接输入，忌用图片拷贝一大段文字；

6. 每个论题的PPT控制在15-20页之间；

7. 每页PPT颜色种类不宜太多，3种左右。

同舟共济
渡彼岸!

People in the same boat help each other to cross to the other bank, where….

Thanks for your attention!