SiO_3^2

$$\boxed{F_{i+\frac{1}{2}} = F^{UP}_{i+\frac{1}{2}} + \varphi(r)(F^{LW}_{i+\frac{1}{2}} - F^{UP}_{i+\frac{1}{2}})}$$

1 几种物质输运方程中的平流项数值格式

物质输运方程中的平流项数值格式，往往从最简单的一维情形开始研究。在一维情形下，关于物质变量 $a(x,t)$ 的平流方程在给定速度 u 时为：

正体全文同

$$\partial a / \partial t = -u \partial a / \partial x$$

很多平流项数值格式都是通过考虑网格之间的物质变量通量来计算各网格的物质变量值的，所以可以把它们统称为通量格式。通量格式能够保证物质守恒。假设 u 为常数，则(1)式写成通量的形式为：

$$\partial a / \partial t = -\partial (ua) / \partial x \tag{2}$$

欧拉格式、迎风格式和 Lax-Wendroff 格式是 3 种较为常见的通量格式。欧拉格式是时间前差、空间中央差的有限差分格式，它既耗散又频散，且对方程(2)的解是无条件不稳定的。Lax-Wendroff 格式耗散较小，但频散较严重，在满足 CFL 条件的情况下稳定；迎风格式耗散很大，也在满足 CFL 条件的情况下稳定。

以上 3 种格式一般认为是最基本的三种通量格式。后来通量格式有了很大的发展，演变出很多种方法，而一般可以像 Yang 等(1992)那样把这些方法中的绝大多数分为代数格式和几何格式两类。代数格式基本上都是混合格式，其通量由一个低阶耗散基本格式(比如一阶迎风格式)的通量和一个高阶频散基本格式(比如 Lax-Wendroff 格式)的通量组合而成。各种代数格式之间的不同在于它们计算两个基本格式的通量所占权重的方法不同。几何格式则是在每个网格单元内构造一个关于平流物质变量的变化函数，通过保持其单调性来保证不产生新的极值，交界面处的通量可以用某种上游方法计算。最简单的几何格式为每个网格单元内没有变化，此时相当于一阶迎风格式。可以在每个网格单元内构造线性变化(Van Leer, 1979)，而一种名叫 PPM 的几何格式则在网格单元内构造了抛物线变化(Colella *et al*, 1984)。James(1996)曾测试了一种叫做 TVD 的代数格式和几何格式 PPM 在陆架浅海的表现，其结果显示这两种格式都无频散、低耗散，而 PPM 的数值耗散更小。本文由于需要把 TVD 格式和其它格式作比较，所以在此介绍一下本文所使用的 TVD 格式：

中

TVD 格式是一种代数格式，即它的通量由一个低阶格式的通量和一个高阶格式的通量组合而成。这里用的 TVD 格式是由一阶迎风格式和 Lax-Wendroff 格式组合而成(James, 1996; Roe, 1986; Sweby, 1984)，其总通量为：

$$F_{i+\frac{1}{2}} = F^{UP}_{i+\frac{1}{2}} + \phi(r)(F^{LW}_{i+\frac{1}{2}} - F^{UP}_{i+\frac{1}{2}}) \tag{3}$$

其中 F^{UP} 和 F^{LW} 分别是由迎风格式和 Lax-Wendroff 格式所提供的通量。函数 $\phi(r)$ 是根据物质浓度值 a 的变化确定的限制函数(Yang *et al*, 1992)：

$$r = F^{LMU}_{i+\frac{1}{2}-s} / F^{LMU}_{i+\frac{1}{2}} \tag{4}$$

其中：

$$F^{LMU}_{i+\frac{1}{2}} = F^{LW}_{i+\frac{1}{2}} - F^{UP}_{i+\frac{1}{2}} \tag{5}$$

$$= (\left|u_{i+\frac{1}{2}}\right|) - \Delta t u^2_{i+\frac{1}{2}} / \Delta x)(a_{i+1} - a_i) / 2 \tag{6}$$

以及：

斜体

$$s = \mathrm{sign}(u_{i+\frac{1}{2}}) \tag{7}$$

如果 $F^{LMU}_{i+\frac{1}{2}} = 0$，则取 $r = 0$，此时等式(10)对任何有限的 $\phi(r)$ 都有：$F_{i+\frac{1}{2}} = F^{UP}_{i+\frac{1}{2}} = F^{LW}_{i+\frac{1}{2}}$。

有很多限制函数可供 TVD 格式调用(Yang *et al*, 1992; Roe, 1986; Sweby, 1984)。其中包括：

$$\text{Minimode:} \quad \phi(r) = \max(0, \min(1, r)) \tag{8}$$

$$\text{Monotonic:} \quad \phi(r) = (r + |r|)/(1 + r) \tag{9}$$

$$\text{MUSCL:} \quad \phi(r) = \max(0, \min(2, 2r, (1+r)/2)) \tag{10}$$

$$\text{Superbee:} \quad \phi(r) = \max(0, \min(2r, 1), \min(r, 2)) \tag{11}$$

统一字号

这些限制函数具有不同的保持锋面的能力。本文中的例子里采用 superbee 限制函数，它被认为是耗散最小的限制函数之一(Yang *et al*,1992; Roe, 1986; Sweby, 1984)。

欧拉-拉格朗日方法则是与通量格式不同的另一类平流项数值格式(Zhu *et al*, 2001; Neuman, 1981; Cheng *et al*, 1984; Casulli, 1990)。这类方法在计算物质输运方程中平流项时，首先采用逆向跟踪法确定水质点的历史位置，再用拉格朗日插值的方法确定该点的平流物质变量的值。以一维平流方程(1)为例，该式可以写为拉格朗日形式：

$$\mathrm{d}a / \mathrm{d}t = 0 \tag{12}$$

即水质点的物质浓度值在只考虑平流的情况下不随时间而改变。所以如果 n+1 时刻位于网格点 Q 的水质点在 n 时刻位于 P 点，那么只考虑平流有：

$$a^{n+1}(Q) = a^n(P) \tag{13}$$

所以只要确定 P 点在 n 时刻的坐标位置，就可以用拉格朗日插值法求出 $a^n(P)$ 从而得到 $a^{n+1}(Q)$ 的值。在二维或三维情形中的处理方法也同样如此。确定 P 点在 n 时刻的坐标位置，可以用多步逆向跟踪法或者预估修正法等方法确定；插值 $a^n(P)$ 则根据插值方法的不同有好几种方法，一般来说，一阶拉格朗日插值耗散太大，二阶插值往往比较适用。Zhu 等(2001)等

特殊格式标注示样

$$\boxed{U^k_{37} = C^a_{37:x} / (C^b_{37:2} + C^c_{37:3})}$$