



国家出版基金项目
NATIONAL PUBLICATION FOUNDATION



信息与计算科学丛书 — 78

扩散方程计算方法

袁光伟 盛志强 杭旭登 著
姚彦忠 常利娜 岳晶岩



科学出版社



“十二五”国家重点图书出版规划项目

信息与计算科学丛书 78

扩散方程计算方法

袁光伟 盛志强 杭旭登 著
姚彦忠 常利娜 岳晶岩

科学出版社

北京

内 容 简 介

本书介绍扩散方程的计算方法,重点介绍作者近十年来取得的研究进展.内容包括:扩散方程几类常见的有限体积格式;扭曲网格上具有保正性和保持离散极值原理的有限体积格式;非线性迭代方法和并行计算格式等.

本书可供理工科研究生及相关科技工作者阅读参考.

图书在版编目(CIP)数据

扩散方程计算方法/袁光伟等著. —北京:科学出版社,2015.11

(信息与计算科学丛书)

“十二五”国家重点图书出版规划项目

ISBN 978-7-03-046388-3

I. ①扩… II. ①袁… III. ①扩散方程—计算方法 IV. ①O175.26

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2015) 第 274920 号

责任编辑:王丽平/责任校对:邹慧卿

责任印制:张倩/封面设计:陈敬

科学出版社 出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

北京通州皇家印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2015年11月第一版 开本:720×1000 1/16

2015年11月第一次印刷 印张:18 1/4 彩插:2页

字数:378 000

定价:128.00元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

《信息与计算科学丛书》编委会

主 编：石钟慈

副主编：王兴华 余德浩

编 委：（按姓氏拼音排序）

白峰杉 白中治 陈发来 陈志明 陈仲英
程 晋 鄂维南 郭本瑜 何炳生 侯一钊
舒其望 宋永忠 汤 涛 吴 微 徐宗本
许进超 羊丹平 张平文

《信息与计算科学丛书》序

20 世纪 70 年代末, 由已故著名数学家冯康先生任主编、科学出版社出版了一套《计算方法丛书》, 至今已逾 30 册. 这套丛书以介绍计算数学的前沿方向和科研成果为主旨, 学术水平高、社会影响大, 对计算数学的发展、学术交流及人才培养起到了重要的作用.

1998 年教育部进行学科调整, 将计算数学及其应用软件、信息科学、运筹控制等专业合并, 定名为“信息与计算科学专业”. 为适应新形势下学科发展的需要, 科学出版社将《计算方法丛书》更名为《信息与计算科学丛书》, 组建了新的编委会, 并于 2004 年 9 月在北京召开了第一次会议, 讨论并确定了丛书的宗旨、定位及方向等问题.

新的《信息与计算科学丛书》的宗旨是面向高等学校信息与计算科学专业的高年级学生、研究生以及从事这一行业的科技工作者, 针对当前的学科前沿、介绍国内外优秀的科研成果. 强调科学性、系统性及学科交叉性, 体现新的研究方向. 内容力求深入浅出, 简明扼要.

原《计算方法丛书》的编委和编辑人员以及多位数学家曾为丛书的出版做出了大量工作, 在学术界赢得了很好的声誉, 在此表示衷心的感谢. 我们诚挚地希望大家一如既往地关心和支持新丛书的出版, 以期为信息与计算科学在新世纪的发展起到积极的推动作用.

石钟慈
2005 年 7 月

前 言

扩散方程是工业制造、核反应堆、核废料存储(沉积)管理、地下水渗流、油藏模拟、大气物理、天体物理和等离子体物理等许多应用领域中一类重要的偏微分方程. 它既可描述介质质量扩散过程, 也可描述多介质非线性辐射流体力学问题中的能量传输过程. 其数值模拟涉及新能源开发和国家重大安全利益, 一直是国际科学与工程计算前沿领域中的研究重点.

实际的可压缩多介质辐射流体力学问题中出现具有极高密度比的物质界面, 其高置信度数值模拟对界面分辨精度的要求非常苛刻, 通常采用 Lagrange 坐标描述, 并采用基于物理过程分裂的方法进行数值求解. 当流体出现大变形, 导致 Lagrange 网格出现大变形, 甚至出现凹网格和翻转网格. 辐射扩散方程的离散和求解是在流体力学计算给出的大变形网格上进行的. 并且, 实际计算往往涉及复杂的物理区域, 用单一的结构网格难以给出很好的描述, 需要采用结构网格的拼接, 或者是非结构的网格, 一般不能简单采用正交网格剖分, 因此, 考虑非矩形的扭曲网格上的扩散方程离散是不可避免的. 这种复杂网格结合流体运动使得扩散方程的数值求解变得复杂, 特别是给具有间断系数扩散问题的数值求解带来很大困难.

Lagrange 流体力学计算中的热力学量通常定义在网格中心, 如采用节点中心型方法求解能量扩散方程, 那么与流体力学计算耦合求解时将出现困难, 需将物理量重映到单元中心. 为便于耦合求解, 扩散方程的基本未知量应为单元中心量. 实际计算表明单元中心型守恒格式往往比节点中心型格式具有更高的精度, 它可避免过多的数值耗散, 而节点中心型格式出现明显数值耗散. 因此, 为便于与流体力学 Lagrange 方法耦合计算, 需要重点研究单元中心型扩散格式.

辐射扩散计算在实际的辐射流体力学问题求解中占据重要地位, 其计算精度直接影响系统能量的传输、分配和交换, 是确保整个物理过程高精度模拟的关键. 因此, 对于大变形网格上间断系数扩散问题, 要求扩散计算格式是健壮高效的, 即要求数值解的精度不随网格不断变形而显著降低以致完全失真, 且可快速求解. 除了要求离散格式具有较高精度外, 还必须保持能量输运或质量扩散过程的守恒性, 并且还必须保持能量传输或质量扩散的方向是正确的, 避免非物理的数值振荡和计算出负, 从而保证数值解是在物理上有意义的解.

扩散方程离散的关键是对(广义的)梯度微分算子和散度微分算子的复合算子的离散. 复合算子为二阶算子, 比一阶偏微分方程离散的网格模板要大, 其离散设计较为复杂. 在扭曲网格上许多现有的离散格式的精度明显下降, 而且出现非物

理振荡,即使在正交网格上,对隐式格式所形成的非线性代数方程组的求解也存在困难.

总之,随着应用领域中精密化物理研究的深入,对高效高置信度数值模拟提出了日益迫切的需求,如何设计求解实际的多介质非线性扩散方程的高精度高效数值方法,从而及时为重大实验的理论设计提供实用可靠的算法,成为目前亟待解决的挑战性难题.

本书主要讨论扩散方程的单元中心型有限体积格式,包括网格节点加权平均九点计算格式、网格中心与节点耦合的计算格式、保正格式、保持离散极值原理的格式和非负性修正算法,以及非匹配网格上的守恒格式等.并且,还将介绍非线性扩散方程的非线性迭代方法,包括 Picard 迭代、Picard-Newton 迭代,以及时间步长控制方法.最后,将介绍并行格式的构造,包括二阶精度无条件稳定的并行格式和守恒型并行格式等.

作者感谢国家出版基金和国家自然科学基金面上项目 (11171036, 11301033) 以及中国工程物理研究院科学技术基金重点项目 (2014A0202009) 的资助.

作 者

2015 年 10 月于北京

目 录

| | |
|----------------------|----|
| 第 1 章 扩散方程的有限体积格式简介 | 1 |
| 1.1 可允许网格上的有限体积格式 | 1 |
| 1.2 多点通量逼近方法 | 2 |
| 1.3 支撑算子方法 | 7 |
| 1.3.1 局部支撑算子方法 | 7 |
| 1.3.2 有通量表达式的支撑算子方法 | 10 |
| 1.4 菱形格式 | 13 |
| 1.5 非线性格式 | 18 |
| 1.6 格式构造思路 | 20 |
| 第 2 章 网格节点加权平均九点格式 | 23 |
| 2.1 九点格式的推导 | 23 |
| 2.2 一般扩散方程的九点格式 | 26 |
| 2.3 网格节点值的计算公式 | 28 |
| 2.3.1 光滑系数问题 | 28 |
| 2.3.2 间断系数问题 | 29 |
| 2.4 九点格式的切向差计算 | 35 |
| 2.4.1 九点格式切向差计算的基本思想 | 35 |
| 2.4.2 加权系数的计算公式 | 36 |
| 2.4.3 严重扭曲情形 | 38 |
| 2.4.4 自适应方法 | 40 |
| 2.5 九点格式的理论结果 | 41 |
| 2.5.1 稳定性分析 | 42 |
| 2.5.2 收敛性分析 | 44 |
| 2.6 非定常扩散方程的九点格式 | 45 |
| 2.7 数值算例 | 47 |
| 2.7.1 各向异性光滑系数问题 | 47 |
| 2.7.2 间断系数问题 | 48 |
| 2.7.3 自适应切向差格式算例 | 49 |
| 第 3 章 单元中心-节点型格式 | 53 |
| 3.1 光滑系数问题的格式构造 | 53 |

| | | |
|--------------|--------------------|-----------|
| 3.2 | 格式的收敛性 | 57 |
| 3.3 | 非定常扩散方程的格式 | 60 |
| 3.4 | 间断系数问题的格式 | 62 |
| 3.5 | 解耦格式 | 66 |
| 3.5.1 | 基本网格上的格式 | 66 |
| 3.5.2 | 节点未知量的计算方法 | 68 |
| 3.5.3 | 格式的收敛性 | 72 |
| 3.6 | 数值算例 | 72 |
| 3.6.1 | 光滑系数问题 | 72 |
| 3.6.2 | 间断系数问题 | 73 |
| 3.6.3 | 解耦格式的数值结果 | 74 |
| 3.6.4 | 线性抛物问题 | 75 |
| 第 4 章 | 非匹配网格上的守恒格式 | 76 |
| 4.1 | 构造格式的一般方法 | 76 |
| 4.2 | 非匹配网格边上辅助未知量的重构 | 78 |
| 4.2.1 | 自适应模板方法 | 78 |
| 4.2.2 | 通量平衡点方法 | 80 |
| 4.2.3 | 切向导数的近似 | 81 |
| 4.3 | 非匹配网格节点处辅助未知量的重构 | 82 |
| 4.3.1 | 悬点处未知量的重构 | 82 |
| 4.3.2 | 简单加权平均法 | 85 |
| 4.3.3 | 最小二乘法 | 85 |
| 4.4 | 数值算例 | 86 |
| 4.4.1 | 光滑各向异性问题 | 87 |
| 4.4.2 | 垂直断层问题 | 88 |
| 4.4.3 | 常数及间断系数问题 | 89 |
| 4.4.4 | 间断各向异性问题 | 91 |
| 第 5 章 | 守恒的非负性修正方法 | 94 |
| 5.1 | 非负性修正方法一 | 94 |
| 5.1.1 | 任意多边形网格上的菱形格式 | 94 |
| 5.1.2 | Picard 迭代方法 | 96 |
| 5.1.3 | 保持局部守恒的强制数值解非负的算法 | 96 |
| 5.1.4 | 初始迭代步的值 | 99 |
| 5.1.5 | 非负性算法的计算流程 | 99 |
| 5.2 | 非负性修正方法二 | 99 |

| | | |
|--------------|--------------------|------------|
| 5.2.1 | 守恒的遇负置零算法 | 100 |
| 5.2.2 | GCENZ 算法的精度分析 | 102 |
| 5.2.3 | GCENZ 算法的流程 | 103 |
| 5.3 | 非负性修正方法三 | 104 |
| 5.3.1 | 结构网格剖分计算区域 | 104 |
| 5.3.2 | 一维情形的修补方法 | 105 |
| 5.3.3 | 二维情形的修正方法 | 107 |
| 5.3.4 | 算法的执行步骤 | 108 |
| 5.4 | 数值算例 | 109 |
| 第 6 章 | 保正格式 | 116 |
| 6.1 | 自适应节点型保正格式 | 116 |
| 6.1.1 | 问题与记号 | 116 |
| 6.1.2 | 格式构造 | 117 |
| 6.1.3 | Robin 边界条件 | 121 |
| 6.1.4 | 特殊情形 | 123 |
| 6.1.5 | 离散系统 | 125 |
| 6.1.6 | 保正性 | 126 |
| 6.2 | 自适应边中点型保正格式 | 127 |
| 6.3 | 模板固定型保正格式 | 130 |
| 6.3.1 | 多边形网格上的格式 | 130 |
| 6.3.2 | 四边形网格上的格式 | 133 |
| 6.4 | 完全保正格式 | 136 |
| 6.4.1 | 格式构造 | 136 |
| 6.4.2 | 边中点未知量的消去方法 | 137 |
| 6.4.3 | 节点未知量的消去方法 | 138 |
| 6.4.4 | 迭代求解方法 | 142 |
| 6.5 | 边中点未知量的消去方法 | 142 |
| 6.6 | 数值算例 | 145 |
| 6.6.1 | 精度 | 145 |
| 6.6.2 | 保正性 | 148 |
| 6.6.3 | 强间断全张量问题 | 149 |
| 第 7 章 | 保持离散极值原理的格式 | 151 |
| 7.1 | 自适应保极值原理格式 | 151 |
| 7.1.1 | 单边法向通量 | 151 |
| 7.1.2 | 守恒法向通量 | 153 |
| 7.1.3 | 格式及其求解方法 | 159 |

| | | |
|--------------|--------------------------------|------------|
| 7.2 | 极值原理和存在性 | 160 |
| 7.2.1 | 极值原理 | 160 |
| 7.2.2 | 存在性 | 161 |
| 7.3 | 数值算例 | 163 |
| 7.3.1 | 极值原理 | 163 |
| 7.3.2 | 精度 | 165 |
| 第 8 章 | 非线性迭代方法 | 167 |
| 8.1 | Picard 迭代 | 167 |
| 8.2 | Picard-Newton 迭代 | 170 |
| 8.2.1 | 迭代格式设计 | 170 |
| 8.2.2 | 理论分析 | 172 |
| 8.2.3 | Picard-Newton 方法与 Newton 方法的区别 | 181 |
| 8.3 | 时间步长控制 | 184 |
| 8.4 | 数值算例 | 186 |
| 8.4.1 | $\Delta u/u$ 方法的结果 | 188 |
| 8.4.2 | CFL 方法的结果 | 191 |
| 8.4.3 | 无导数的 Picard-Newton 迭代方法 | 193 |
| 第 9 章 | 线性问题的并行差分格式 | 195 |
| 9.1 | DFE-I 并行格式的稳定性 | 195 |
| 9.1.1 | 稳定性的概念 | 195 |
| 9.1.2 | DFE-I 并行差分格式的稳定性分析 | 196 |
| 9.2 | 抛物型方程移动界面的并行差分格式 | 201 |
| 9.2.1 | 并行格式 1 | 202 |
| 9.2.2 | 并行格式 2 | 202 |
| 9.3 | 一维二阶精度无条件稳定格式的构造 | 203 |
| 9.3.1 | 并行格式 3 | 204 |
| 9.3.2 | 并行格式 4 | 205 |
| 9.4 | 一维格式的理论分析 | 206 |
| 9.4.1 | 格式的稳定性 | 206 |
| 9.4.2 | 格式的收敛性 | 210 |
| 9.5 | 二维二阶精度无条件稳定格式的构造 | 212 |
| 9.5.1 | 并行格式 5 | 213 |
| 9.5.2 | 并行格式 6 | 215 |
| 9.6 | 二维格式的理论分析 | 217 |
| 9.6.1 | 格式的稳定性 | 217 |

| | | |
|-------------------------|------------------------|------------|
| 9.6.2 | 格式的收敛性 | 221 |
| 9.7 | 数值算例 | 224 |
| 9.7.1 | DFE-I 格式的算例 | 224 |
| 9.7.2 | 移动界面并行格式的算例 | 226 |
| 9.7.3 | 并行格式 3 的算例 | 227 |
| 9.7.4 | 并行格式 5 的算例 | 228 |
| 第 10 章 | 非线性问题的并行格式 | 230 |
| 10.1 | 方程和记号 | 230 |
| 10.2 | 并行格式的构造 | 231 |
| 10.3 | 先验估计、存在性与收敛性 | 234 |
| 10.4 | 稳定性和唯一性 | 237 |
| 10.5 | 数值算例 | 239 |
| 第 11 章 | 守恒型并行离散格式 | 242 |
| 11.1 | 一维守恒型并行格式 | 242 |
| 11.1.1 | 基于界面显式通量的守恒并行格式 | 243 |
| 11.1.2 | 基于界面预估的守恒型并行格式 | 243 |
| 11.1.3 | 基于界面守恒修正的并行格式 | 249 |
| 11.1.4 | 第二种界面守恒修正方式 | 253 |
| 11.1.5 | 非线性并行迭代格式 | 254 |
| 11.1.6 | 守恒型并行迭代格式 | 255 |
| 11.1.7 | 基于界面守恒修正的并行迭代格式 | 256 |
| 11.2 | 二维守恒型并行格式的设计方法 | 258 |
| 11.2.1 | 九点格式及其迭代方法 | 260 |
| 11.2.2 | 守恒型并行迭代算法 | 262 |
| 11.2.3 | 在内界面处采用 Dirichlet 边界条件 | 263 |
| 11.2.4 | 在内界面处采用 Neumann 边界条件 | 264 |
| 11.2.5 | 守恒型并行算法步骤 | 264 |
| 11.3 | 数值算例 | 265 |
| 11.3.1 | 守恒型并行格式的算例 | 265 |
| 11.3.2 | 守恒并行九点格式的算例 | 266 |
| 参考文献 | | 269 |
| 索引 | | 273 |
| 《信息与计算科学丛书》已出版书目 | | 274 |

第 1 章 扩散方程的有限体积格式简介

本章简要介绍几种常用的有限体积格式, 包括可允许网格上的有限体积格式、多点通量逼近方法、支撑算子方法、菱形格式和非线性格式等.

1.1 可允许网格上的有限体积格式

考虑如下二维扩散问题:

$$-\nabla \cdot (\kappa(x)\nabla u(x)) = f(x), \quad x \in \Omega, \quad (1.1)$$

$$u(x) = g(x), \quad x \in \partial\Omega, \quad (1.2)$$

其中 Ω 为平面上的多边形区域, κ 为扩散系数, f 为源项.

下面介绍可允许网格上的离散格式. 首先给出可允许网格的定义.

定义 1.1.1(可允许网格) Ω 为 \mathbf{R}^2 的有界多边形区域. Ω 的可允许有限体积网格为三元族 $(\mathcal{T}, \mathcal{E}, \mathcal{P})$, 其中 \mathcal{T} 为一族“控制体积”, 它们是 Ω 中有限个凸多边形, \mathcal{E} 为 \mathbf{R}^2 上一族包含于 $\bar{\Omega}$ 中的线段, \mathcal{P} 为 $\bar{\Omega}$ 中的一族点. $(\mathcal{T}, \mathcal{E}, \mathcal{P})$ 具有如下性质:

(i) 所有控制体的并的闭包为 $\bar{\Omega}$,

(ii) 对任意 $K \in \mathcal{T}$, $\exists \mathcal{E}$ 的子集 \mathcal{E}_K 使得 $\partial K = \bar{K} - K = \bigcup_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \bar{\sigma}$, 且 $\mathcal{E} = \bigcup_{K \in \mathcal{T}} \mathcal{E}_K$,

(iii) 对任意 $(K, L) \in \mathcal{T}^2$, $K \neq L$, 或者 $\bar{K} \cap \bar{L}$ 的一维 Lebesgue 测度为 0, 或者对某个 $\sigma \in \mathcal{E}$, $\bar{K} \cap \bar{L} = \bar{\sigma}$, 记 $\sigma = K|L$,

(iv) $\mathcal{P} = (x_K)_{K \in \mathcal{T}}$ 使得 $x_K \in K$ (对所有 $K \in \mathcal{T}$), x_K 称为单元 K 的中心, 如果 $\sigma = K|L$, 假定 $x_K \neq x_L$, 且通过 x_K 和 x_L 的直线 $\mathcal{D}_{K,L}$ 垂直于 $K|L$,

(v) 对任意 $\sigma \in \mathcal{E}$ 使得 $\sigma \subset \partial\Omega$, 记 K 为满足 $\sigma \in \mathcal{E}_K$ 的控制体, $\mathcal{D}_{K,\sigma}$ 为通过 x_K 且垂直于 σ 的直线, 那么假定 $\mathcal{D}_{K,\sigma} \cap \sigma \neq \emptyset$ 成立, 记 $y_\sigma = \mathcal{D}_{K,\sigma} \cap \sigma$.

从直观上来说, 可允许网格是这样一种网格剖分, 其相邻单元中心连线与公共边垂直. 例如 Voronoï 网格就是一种可允许网格.

记单元大小 $\text{size}(\mathcal{T}) = \sup\{\text{diam}(K), K \in \mathcal{T}\}$. 对任意 $K \in \mathcal{T}$, $\sigma \in \mathcal{E}$, $m(K)$ 是 K 的二维 Lebesgue 测度 (面积), $m(\sigma)$ 为 σ 的一维 Lebesgue 测度 (长度). 内部边的集合记为 \mathcal{E}_{int} , 边界边的集合记为 \mathcal{E}_{ext} , 即 $\mathcal{E}_{\text{int}} = \{\sigma \in \mathcal{E}; \sigma \cap \partial\Omega = \emptyset\}$, $\mathcal{E}_{\text{ext}} = \{\sigma \in \mathcal{E}; \sigma \subset \partial\Omega\}$.

K 的邻域集记为 $\mathcal{N}(K)$, 即 $\mathcal{N}(K) = \{L \in \mathcal{T}; \exists \sigma \in \mathcal{E}_K, \bar{\sigma} = \bar{K} \cap \bar{L}\}$.

如果 $\sigma = K|L$, 记 $d_\sigma = d_{K|L} = |x_K - x_L|$, $d_{K,\sigma}$ 为 $x_K y_\sigma$ 到 σ 的距离. 如果 $\sigma \in \mathcal{E}_K \cap \mathcal{E}_{\text{ext}}$, 记 $d_\sigma = |x_K - x_\sigma|$.

对任意 $\sigma \in \mathcal{E}$, 通过 σ 的“横截性”定义为 $\tau_\sigma = \frac{m(\sigma)}{d_\sigma}$.

现在给出问题 (1.1)–(1.2) 的有限体积格式. 记

$$f_K = \frac{1}{m(K)} \int_K f(x) dx, \quad \forall K \in \mathcal{T},$$

$(u_K)_{K \in \mathcal{T}}$ 为离散未知量, 对 $K \in \mathcal{T}$ 和 $\sigma \in \mathcal{E}_K$ 引入通量 $F_{K,\sigma}$.

对 $\sigma \in \mathcal{E}$, u 在 σ 上的逼近为 u_σ . 对 $K \in \mathcal{T}$, $\sigma \in \mathcal{E}_K$, 记 $n_{K,\sigma}$ 为 σ 上 K 的单位外法向量. 记 $v_{K,\sigma} = \int_\sigma \kappa \nabla u(x) \cdot n_{K,\sigma} d\gamma(x)$.

则可允许网格上的有限体积格式为

$$\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} F_{K,\sigma} = m(K) f_K, \quad \forall K \in \mathcal{T},$$

其中

$$F_{K,\sigma} = -\tau_{K|L}(u_L - u_K), \quad \forall \sigma \in \mathcal{E}_{\text{int}}, \sigma = K|L,$$

$$F_{K,\sigma} = -\tau_\sigma(g(x_\sigma) - u_K), \quad \forall \sigma \in \mathcal{E}_{\text{ext}}, \sigma \in \mathcal{E}_K,$$

这里 $F_{K,\sigma}$ 是 $v_{K,\sigma}$ 的一个逼近.

关于可允许网格上的有限体积格式, 可进一步参考文献 [1].

1.2 多点通量逼近方法

将 (1.1) 在一个给定的网格单元 K 上积分, 并利用 Green 公式, 可得

$$\sum_{i \in \partial K} f_i = \int_K f(x) dx,$$

其中单元 K 的第 i 条边上的法向通量为

$$f_i = - \int_i \kappa(x) \nabla u \cdot n ds, \quad (1.3)$$

这里 n 为单元 K 的第 i 条边上的单位外法向量.

通量 (1.3) 将由以下的多个单元中心值的线性组合来近似:

$$f_i \approx \sum_{j \in J} t_{ij} u_j, \quad (1.4)$$

其中 $\sum_{j \in J} t_{ij} = 0$, 系数 t_{ij} 为传递系数, u_j 为单元 j 的中心值, 集合 J 依赖于网格.

对二维四边形网格, J 由 6 个单元的标号组成, 见图 1.1. 所得的方法称为多点通量逼近方法^[2].

下面考虑表达式 (1.4) 中的传递系数的计算.

考虑图 1.1 中由实线所示的网格. 假设扩散系数在每个单元 (控制体) 上为常数, u 的值定义在单元中心. 通过连接单元中心和单元边的中点, 可以得到一个对偶网格, 见图 1.1 中虚线所示的网格. 有时为了区别起见将实线所示的网格称为主网格或基本网格. 对偶网格称为相互影响区域. 在二维情况, 对偶网格将网格边分为两部分, 每一个部分称为子边.

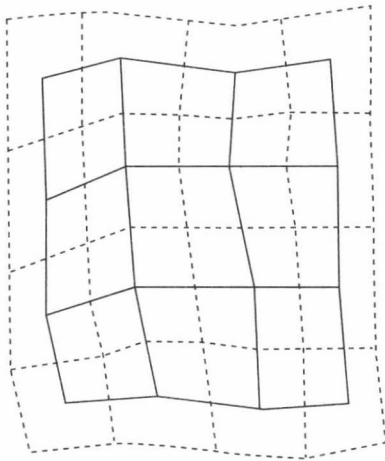


图 1.1 主网格与对偶网格

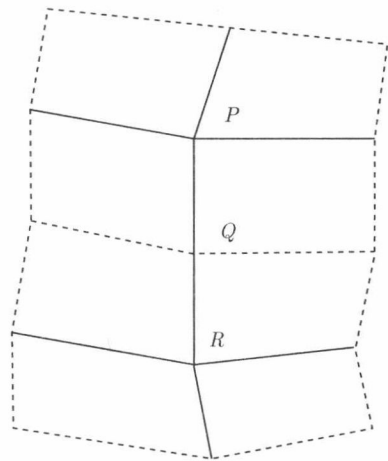


图 1.2 两个相互影响区域

多点通量逼近方法就是使得相互影响区域中的单元之间的局部影响决定所有子边的传递系数. 一旦所有子边上的传递系数都被确定, 则可以通过组合子边的贡献而得到单元边上的传递系数. 对图 1.2 所示的四边形网格, 子边 PQ 和 QR 构成单元边 PR . 一个单元边的传递系数来源于两个相邻的相互影响区域的贡献.

在一个相互影响区域内, 有以下条件成立: 越过子边的温度和通量连续. 假设在相互影响区域的每个单元上温度可通过线性函数描述. 然而, 不可能要求温度和通量在相互影响区域的所有子边上连续. 例如, 在 4 个单元中分别对温度作线性近似, 将导致 $4 \times 3 = 12$ 个自由度. 在 4 条子边上的通量连续将给出 4 个条件, 在每条子边上的温度连续条件将给出 8 个条件. 另外, 线性函数必须考虑单元中心值, 这又将给出 4 个条件. 因此, 总共有 16 个条件和 12 个自由度. 为此, 只要求温度在每条边的中点连续. 在图 1.3 中, 边中点是指点 A, B, C 和 D . 从而对 12 个自由度只

有 12 个条件. 以上给出的方法称为 O 方法. 还可以选择其他的连续性条件以及其他的连续点.

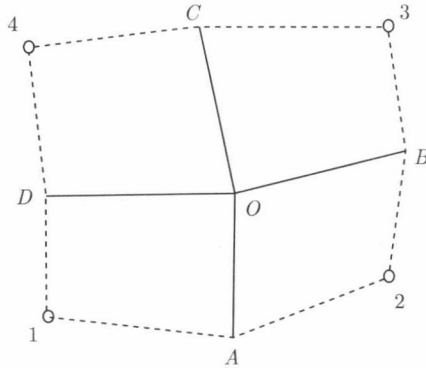


图 1.3 相互影响区域 (单元中心为 1, 2, 3, 4, 边中点为 A, B, C, D)

注意到传递系数仅仅依赖于网格几何和扩散系数, 从而传递系数的计算可以作为一个预处理提前计算.

在每个单元 j 上的扩散系数记为 κ_j . 为了计算子边上的通量的表达式

$$f_i = -n_i^T \kappa_j \nabla U_j, \quad (1.5)$$

需要计算梯度 ∇U_j 和法向量 n_i , 该法向量的长度为所在子边的长度.

在每个单元 j 上, 假定温度 U_j 为线性函数, 从而可以写成

$$U_j(x) = \nabla U_j \cdot (x - x_{j_0}) + u_{j_0}, \quad (1.6)$$

其中 u_{j_0} 是在单元 j_0 的中心 x_{j_0} 处的值. 梯度可以方便地由单元 j 的子边上的连续点 \bar{x}_{jk} 上的温度的值决定. 连续点和单元中心如图 1.4 所示.

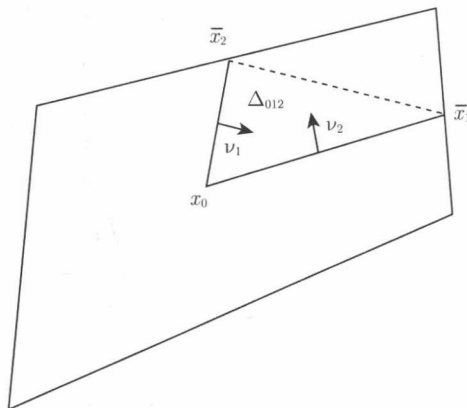


图 1.4 单元中心 $x_{j_0} = x_0$ 和连续点 $\bar{x}_i (i = 1, 2)$

下面将给出梯度 ∇U_j 的表达式.

在二维情形, 每个单元上的梯度 ∇U 由两个为常数的分量组成. 令 $\bar{u}_k = U(\bar{x}_k), k = 1, 2$, 则

$$\nabla U \cdot (\bar{x}_k - x_0) = \bar{u}_k - u_0, \quad k = 1, 2. \quad (1.7)$$

以上方程能改写为

$$X \nabla U = \begin{pmatrix} \bar{u}_1 - u_0 \\ \bar{u}_2 - u_0 \end{pmatrix}, \quad (1.8)$$

其中 X 为如下定义的矩阵:

$$X = \begin{pmatrix} (\bar{x}_1 - x_0)^T \\ (\bar{x}_2 - x_0)^T \end{pmatrix}.$$

引入以下旋转矩阵

$$R = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

则对任意一对二维向量 a 和 b , $a^T R b$ 表示 a 和 b 之间的叉乘, 从而 $a^T R a = 0$.

X 的行列式为

$$T = \det X = (\bar{x}_1 - x_0)^T R (\bar{x}_2 - x_0),$$

T 等于由点 x_0, \bar{x}_1 和 \bar{x}_2 所张成的三角形 Δ_{012} 面积的两倍 (向量 $\bar{x}_1 - x_0$ 和 $\bar{x}_2 - x_0$ 形成右手系).

为了得到 X^{-1} 的表达式, 引入向量 $\nu_i (i = 1, 2)$,

$$\nu_1 = R(\bar{x}_2 - x_0), \quad \nu_2 = -R(\bar{x}_1 - x_0).$$

向量 ν_i 是连接点 x_0 和 $\bar{x}_j (j \neq i)$ 的三角形 Δ_{012} 边的内法向量, 长度为此边的长度. 则有

$$X^{-1} = \frac{1}{T} [\nu_1, \nu_2].$$

从而

$$\nabla U = \frac{1}{T} \sum_{k=1}^2 \nu_k (\bar{u}_k - u_0). \quad (1.9)$$