

非结构四面体网格上扩散方程的 有限体积差分方法^{*1)}

殷东生 杜正平 陆金甫

(清华大学数学科学系 北京 100084)

摘 要

基于二维扩散方程的有限体积方法,构造了三维扩散方程在非结构网格上有限体积差分方法,方法具有高精度和保持通量守恒特性.采取单元中心作为计算节点来减少向量和单元体积的计算量.利用通量守恒条件确定界面中心的函数值,保证了方法的守恒特性.用 Lagrange 因子插值法更好地适应了非结构网格.采取 Bi-CGSTAB 方法求解线性代数方程组.计算例子验证方法有效.

关键词: 三维扩散方程,有限体积法,非结构四面体网格

AN UNSTRUCTURED TETRAHEDRAL MESH FINITE VOLUME DIFFERENCE METHOD FOR THE DIFFUSION EQUATION

Yin Dongsheng Du Zhengping Lu Jinfu

(Department of Mathematical Science, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract

Based on the finite volume difference method of 2D diffusion equation, a finite volume difference method for 3D diffusion equation on unstructured tetrahedron grids was constructed. The scheme has high precision and can keep flux conservation. By choosing the cell-center nodes as the calculation nodes, the computational scale of the volumes of cells and vectors is reduced. The cell is divided into 12 small integral domains, which makes the flux density of the interface of cells can be computed more easily. The conditions of flux conservation were used to get the values at the central of interface. Lagrangian multiplier method makes the method more suitable for unstructured grids. Bi-CGSTAB was used to solve linear algebra equations. The scheme shows good characteristic on different grids and can be easily expanded to the numerical simulation of nonlinear problems.

Key words: 3-D diffusion equation, finite volume method, unstructured tetrahedron meshes

* 2003 年 10 月 24 日收到.

1) 国家自然科学基金资助项目 (10176023) 及国防科技重点实验室基金试点项目 (00JS76.8.1JW0110).

§1. 引言

扩散方程的数值模拟是计算流体力学和数值热传导问题中的一个重要的基础性研究课题. 热传导数值计算中需要计算各种非线性的扩散方程. 对流扩散方程和 Navier-Stokes 方程, 也都需要对扩散项进行处理. 所以说, 扩散方程的数值模拟是各种线性、非线性的流体力学方程数值计算的基础. 研究扩散方程的高精度, 高效率 and 守恒的数值方法, 在科学和工程计算中具有重要的理论意义和应用前景. 有限体积方法在控制体上做积分, 只要界面上的扩散通量对于界面两侧的控制体是相等的, 那么有限体积方法导出的离散方程就可以保证通量守恒. 同时因为采用体积积分, 所以对不规则的区域的适应性也非常好. 非结构网格对不规则区域具有十分灵活的适应能力, 处理复杂计算区域更加有效. 研究扩散问题的非正交网格的有限体积差分方法具有非常重大的理论意义和应用前景.

李德元^[4] 等在非矩形网格上采用回路积分法得到了扩散方程的有限体积差分格式, 在他们二维工作的基础上, 陈光南^[7] 等得到了结构的非正交六面体网格上的扩散方程的差分格式. Fue-Sang Lien^[3] 对非结构三角型网格采用类似的处理技巧, 建立了二维扩散方程的有限体积差分格式. Palmer^[2] 建立了二维非结构网格上扩散方程的计算方法, 通过界面梯度的关系来插值, 方法具有二阶精度, 有很好的守恒性. 在 Palmer 工作的基础上, 我们把他的方法推广到三维扩散方程, 发展了三维扩散方程的非结构四面体网格上的有限体积差分方法. 数值实验结果表明, 算法有较高计算精度, 能保持通量守恒, 能适应大变形非结构网格的数值模拟.

§2. 有限体积差分格式

考虑下面的扩散方程

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}, & (x, y, z) \in \Omega, t \in (0, T], \\ u(x, y, z, t)|_{\partial\Omega} = f(x, y, z, t), & (x, y, z, t) \in \partial\Omega \times (0, T], \\ u(x, y, z, 0) = g(x, y, z), & (x, y, z) \in \Omega, \end{cases} \quad (1)$$

其中 $\partial\Omega$ 是区域的边界. 首先对区域 Ω 进行网格剖分. $\Omega = \bigcup_{i,j,k} \{V_{i,j,k}, 1 \leq i \leq I, 1 \leq j \leq J, 1 \leq k \leq K\}$, 其中 $V_{i,j,k}$ 是四面体. 以 $P_{l,m,p}$ 表示四面体网格的节点, 每四个节点形成一个四面体. 用 $Z_{i,j,k}$ 表示四面体的中心 (是指形成几何体的各节点的坐标值进行算术平均所得到的坐标表示的空间点)(如图 1). 在实际的计算中节点的脚步码是按 x, y, z 方向优先的顺序排列, 设时间步长为 τ .

把方程 (1) 在 $V_{i,j,k}$ 上积分

$$\iiint_{V_{i,j,k}} \frac{\partial u}{\partial t} dV = \iiint_{V_{i,j,k}} \Delta u dV.$$

设 $U_{i,j,k}^n$ 为 $t_n = n\tau$ 时刻 $u(x, y, z, t_n)$ 在 $Z_{i,j,k}$ 的近似值, 那么有

$$\iiint_{V_{i,j,k}} \frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{\partial u_{Z_{i,j,k}}}{\partial t} V \approx \frac{U_{i,j,k}^{n+1} - U_{i,j,k}^n}{\tau} V, \quad (2)$$

这里 V 表示四面体的体积. 同时, 由 Gauss 定理

$$\begin{aligned} \iiint_{V_{i,j,k}} \Delta u dV &= \oint \nabla u \cdot \mathbf{n} dS = \oint \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} dS \\ &\approx \sum_{m=1}^4 \frac{\partial u_{S_m}}{\partial \mathbf{n}} \cdot \mathbf{S}_m \approx \sum_{m=1}^4 \nabla U_m \cdot \mathbf{S}_m. \end{aligned} \quad (3)$$

S_m 是网格的界面, u_{S_m} 是 u 在 S_m 的中心点的值, ∇U_m 表示 $\frac{\partial u_{S_m}}{\partial \mathbf{n}}$ 在 S_m 的重心上的某种近似, 而 \mathbf{n} 表示面的外法向量 (由右手定则确定).

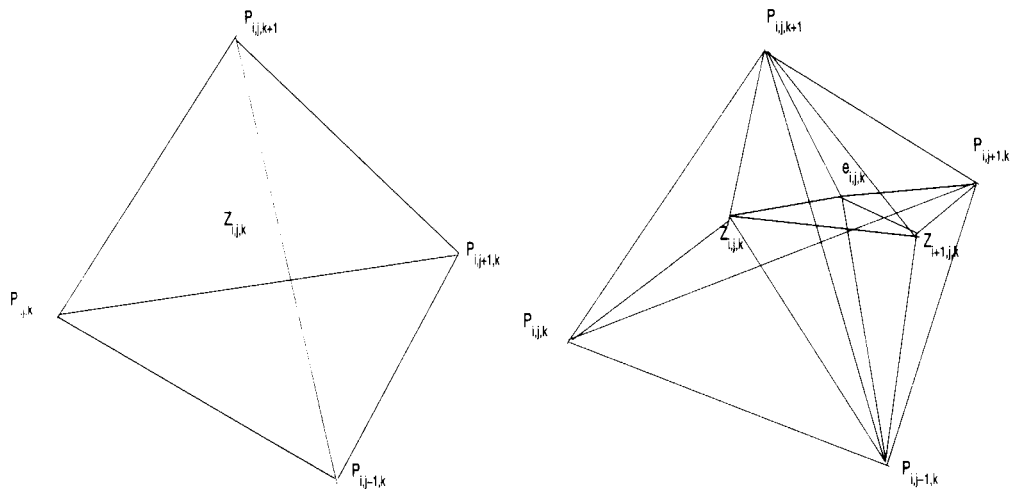


图 1 计算网格

改用单元中心点为计算节点可以减少计算量, 因为如果采用网格点作为计算节点, 需要计算 12 次积分边界的单位外法向量及其长度, 而采用中心点作为计算节点, 只要计算 6 次. 同样, 采用网格点需要计算 12 个小三角形的面积, 而采用中心点只要计算 6 次, 因为 12 个三角形的面积是两两相等的. 另外, 向量乘积计算量采用中心点也要比采用网格点少. 充分考虑到各插值点相对位置对插值计算的影响, 通过守恒条件, 确定界面上的函数值, 由此来确定界面上函数的梯度.

在进行计算之前, 先定义下面的几个函数.

$$V_{1,2,3,4} = \frac{1}{6} \begin{vmatrix} x_2 - x_1 & y_2 - y_1 & z_2 - z_1 \\ x_3 - x_1 & y_3 - y_1 & z_3 - z_1 \\ x_4 - x_1 & y_4 - y_1 & z_4 - z_1 \end{vmatrix}.$$

四边形的顶点是按右手法则来排列的, 以 1 为轴点, 2 为起点, 4 为终点, 这样 $V_{1,2,3,4}$ 就是四面体的体积. 对于三角形 $S_{1,2,3}$ 的面积矢量, 有下面的计算公式 (同样按右手法则来确定方向):

$$S_{1,2,3} = \frac{1}{2} \mathbf{v}_{1,2} \times \mathbf{v}_{1,3} = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ x_2 - x_1 & y_2 - y_1 & z_2 - z_1 \\ x_3 - x_1 & y_3 - y_1 & z_3 - z_1 \end{vmatrix}.$$

对于网格单元界面, 取其中心, 连接中心和该面的三个顶点, 将其分成三个三角形. 以 $Z_{i,j,k}$ 和 $Z_{i+1,j,k}$ 的公共界面为例来说明 (如图 1). 面 $S_{P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}, P_{i,j-1,k}}$ 被 3 个网格点和三角形的中心 $e_{i,j,k}$ 分成三个三角形. 在建立差分格式时, 以网格单元自身为积分区域.

由 (3) 知道, 问题的关键是如何得到 ∇U_m , 所以我们分别求出 ∇U_m 在三个小三角形上的值, 然后作加权平均来求整个面上的 ∇U_m . 每个小三角形上的梯度得近似值则用网格中心点和小三角形组成的小四面体上的值作为近似. 首先对三角形 A, B, C 的符号作一个说明.

$\mathbf{n}_{A,B,C}$ 表示三角区域 A, B, C 的单位外法向量, 其方向由右手法则确定 (以 A 为轴点, B 为起点, C 为终点). $S_{A,B,C}$ 表示三角形 A, B, C 的面积矢量. $\nabla u_{A,B,C}$ 是 ∇u 在三角形的近似值的平均; 同理 $u_{A,B,C}$ 表示 u 在三角形 A, B, C 的近似值的平均. $V_{i,j,k,l}$ 表示四面体的体积 (i, j, k, l 为顶点的四面体). 基于上面的想法, 我们有下面的差分格式

$$\frac{U_{Z_{i,j,k}}^{n+1} - U_{Z_{i,j,k}}^n}{\tau} V_{P_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}, P_{i,j-1,k}} = \sum_{m=1}^4 \left(\sum_{k=1}^3 \nabla U_{mk}^{n+1} \cdot S_{mn} \right) \cdot \mathbf{n}_m. \quad (4)$$

下面说明三角形 $S_{P_{i,j-1,k}, P_{i,j+1,k}, P_{i,j,k+1}}$ 上的梯度 $\nabla u_{e_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}}$ 的计算方法. 为简便起见, 我们把各个面表示出来 (图 2). 这样整个四面体被分割成 12 个小四面体, 这些小四面体就是我们的控制体. 这样就有

$$\nabla U_{e_{i,j,k}, P_{i,j+1,k}, P_{i,j,k+1}} \approx \frac{\iiint_{V_{e_{i,j,k}, Z_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}}} \nabla u dV}{V_{e_{i,j,k}, Z_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}}}.$$

又因为

$$\iiint_V \nabla u dV = \int \int_{\partial V} u n dS,$$

则

$$\nabla U_{e_{i,j,k}, P_{i,j+1,k}, P_{i,j,k+1}} \approx -\frac{S_{e_{i,j,k}, P_{i,j+1,k}, P_{i,j,k+1}} U_{Z_{i,j,k}} + S_{Z_{i,j,k}, e_{i,j,k}, P_{i,j+1,k}} U_{P_{i,j,k+1}}}{3V_{e_{i,j,k}, Z_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}}}$$

$$\frac{S_{Z_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}, e_{i,j,k}} U_{P_{i,j+1,k}} + S_{Z_{i,j,k}, P_{i,j+1,k}, P_{i,j,k+1}} U_{e_{i,j,k}}}{3V_{e_{i,j,k}, Z_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}}} \quad (5)$$

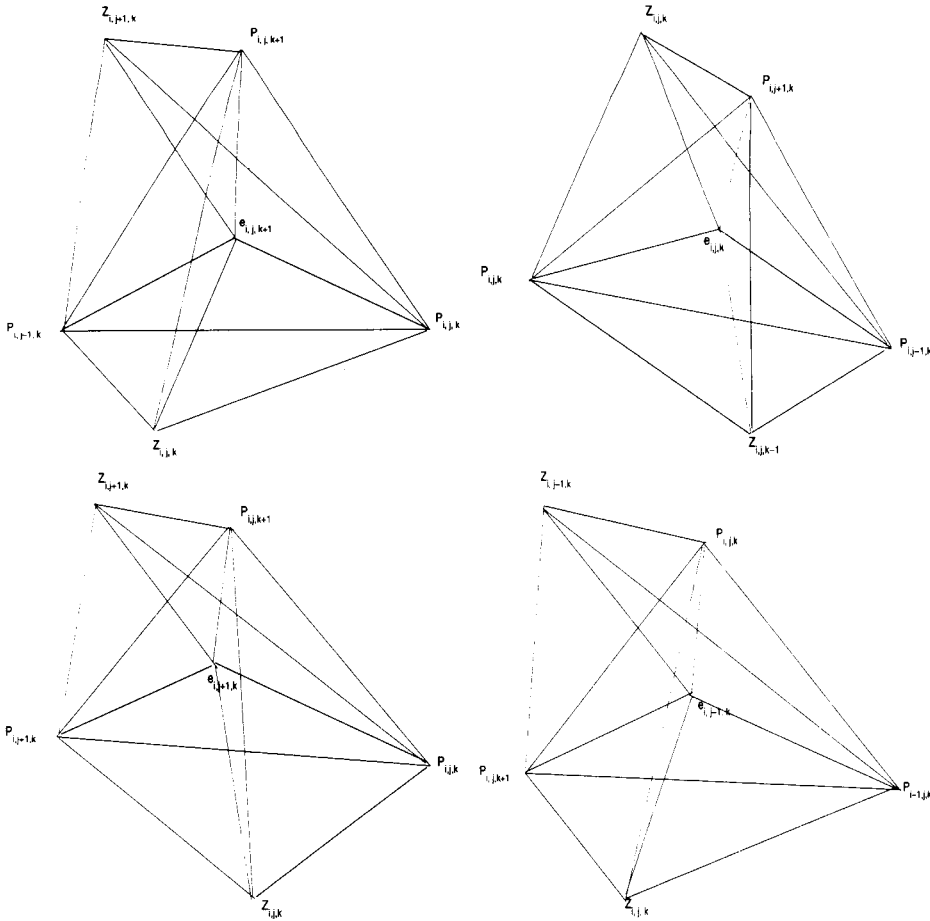


图 2 界面梯度的计算

这里对于四面体的四个三角形面上 u 的平均值用三角形三个顶点的算术平均值来近似, 当然也可以用倒数原则. 上面的公式利用了如下的关系:

$$S_{e_{i,j,k}, P_{i,j+1,k}, P_{i,j,k+1}} + S_{Z_{i,j,k}, e_{i,j,k}, P_{i,j+1,k}} + S_{Z_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}} + S_{Z_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}, e_{i,j,k}} = 0.$$

同样有

$$\begin{aligned} \nabla U_{e_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}} &\approx - \frac{S_{e_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}} U_{Z_{i+1,j,k}} + S_{Z_{i+1,j,k}, P_{i,j+1,k}, e_{i,j,k}} U_{P_{i,j,k+1}}}{3V_{e_{i,j,k}, Z_{i+1,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}}} \\ &\quad - \frac{S_{Z_{i+1,j,k}, e_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}} U_{P_{i,j+1,k}} + S_{Z_{i+1,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}} U_{e_{i,j,k}}}{3V_{e_{i,j,k}, Z_{i+1,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}}} \end{aligned} \quad (6)$$

为了保持差分格式的守恒性, 通过界面 $S_{P_{i,j+1,k}, e_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}}$ 由 $Z_{i,j,k}$ 流向 $Z_{i+1,j,k}$ 的梯度 $\nabla U_{e_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}}$ 与由 $Z_{i+1,j,k}$ 流向 $Z_{i,j,k}$ 的梯度 $\nabla U_{P_{i,j,k+1}, e_{i,j,k}, P_{i,j+1,k}}$ 要满足下面的关系式:

$$S_{P_{i,j,k+1}, e_{i,j,k}, P_{i,j+1,k}} (\nabla U_{e_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}} - \nabla U_{P_{i,j,k+1}, e_{i,j,k}, P_{i,j+1,k}}) = 0. \quad (7)$$

把 (7) 代入 (6) 有

$$U_{e_{i,j,k}} = \frac{A_{Z_{i,j,k}} U_{Z_{i,j,k}} + A_{P_{i,j+1,k}} U_{P_{i,j+1,k}} + A_{P_{i,j,k+1}} U_{P_{i,j,k+1}} + A_{Z_{i+1,j,k}} U_{Z_{i+1,j,k}}}{A_{e_{i,j,k}}}. \quad (8)$$

这里

$$\begin{aligned} A_{Z_{i,j,k}} &= \frac{S_{e_{i,j,k}, P_{i,j+1,k}, P_{i,j,k+1}} \cdot S_{e_{i,j,k}, P_{i,j+1,k}, P_{i,j,k+1}}}{3V_{e_{i,j,k}, Z_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}}}, \\ A_{P_{i,j+1,k}} &= S_{e_{i,j,k}, P_{i,j+1,k}, P_{i,j,k+1}} \left(\frac{S_{Z_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}, e_{i,j,k}}}{3V_{e_{i,j,k}, Z_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}}} - \frac{S_{Z_{i+1,j,k}, e_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}}}{3V_{e_{i,j,k}, Z_{i+1,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}}} \right), \\ A_{P_{i,j,k+1}} &= S_{e_{i,j,k}, P_{i,j+1,k}, P_{i,j,k+1}} \left(\frac{S_{Z_{i,j,k}, e_{i,j,k}, P_{i,j+1,k}}}{3V_{e_{i,j,k}, Z_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}}} - \frac{S_{Z_{i+1,j,k}, P_{i,j+1,k}, e_{i,j,k}}}{3V_{e_{i,j,k}, Z_{i+1,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}}} \right), \\ A_{Z_{i+1,j,k}} &= \frac{S_{e_{i,j,k}, P_{i,j+1,k}, P_{i,j,k+1}} \cdot S_{P_{i,j+1,k}, e_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}}}{3V_{e_{i,j,k}, Z_{i+1,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}}}, \\ A_{e_{i,j,k}} &= S_{e_{i,j,k}, P_{i,j+1,k}, P_{i,j,k+1}} \left(\frac{S_{Z_{i,j,k}, P_{i,j+1,k}, P_{i,j,k+1}}}{3V_{e_{i,j,k}, Z_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}}} - \frac{S_{Z_{i+1,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}}}{3V_{e_{i,j,k}, Z_{i+1,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}}} \right). \end{aligned}$$

把 (8) 代入 (7), 得

$$\begin{aligned} \nabla U_{P_{i,j,k+1}, e_{i,j,k}, P_{i,j+1,k}} &= - \left[(S_{e_{i,j,k}, P_{i,j+1,k}, P_{i,j,k+1}} + S_{Z_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}} \frac{A_{Z_{i,j,k}}}{A_{e_{i,j,k}}}) U_{Z_{i,j,k}} \right. \\ &+ (S_{Z_{i,j,k}, e_{i,j,k}, P_{i,j+1,k}} + S_{Z_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}} A_{P_{i,j,k+1}} / A_{e_{i,j,k}}) U_{P_{i,j,k+1}} \\ &+ (S_{Z_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}, e_{i,j,k}} + S_{Z_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}} A_{P_{i,j,k+1}} / A_{e_{i,j,k}}) U_{P_{i,j+1,k}} \\ &\left. + S_{Z_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}} A_{Z_{i+1,j,k}} / A_{e_{i,j,k}} \cdot U_{Z_{i+1,j,k}} \right] / 3V_{e_{i,j,k}, Z_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}}. \end{aligned}$$

其它面上的梯度可类似得到.

实际计算的时候, 网格节点上的值是未知的, 要通过网格中心点的值通过插值得到, 这里采用 Lagrange 插值法^[1]. 其基本思想是: 决定网格节点的值相当于已知边界而要确定内点的值. 确定内点的值的原理是使该区域内所求函数的 Laplace 算子为零, 也就是把确定网格节点的值看成是常物性、无内热源的稳态扩散问题, 依此原则有

$$u_0 = \frac{\sum_{i=1}^4 W_i u_i}{\sum_{i=1}^4 W_i},$$

这里 $W_i = 1 + \lambda_x(x_i - x_0) + \lambda_y(y_i - y_0) + \lambda_z(z_i - z_0)$, $(x_i, y_i, z_i), i = 1, 2, 3, 4$. 和 (x_0, y_0, z_0) 分别是网格中心点和节点的坐标值. $\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z$ 是这样定义的:

$$\begin{aligned}\lambda_x &= [-R_x(I_{yy}I_{zz} - I_{yz}^2) + R_y(I_{xy}I_{zz} - I_{xz}I_{yz}) - R_z(I_{xy}I_{yz} - I_{yy}I_{zz})]/D, \\ \lambda_y &= [R_x(I_{xy}I_{zz} - I_{yz}I_{xz}) - R_y(I_{xx}I_{zz} - I_{xx}^2) + R_z(I_{xx}I_{yz} - I_{xy}I_{xz})]/D, \\ \lambda_z &= [-R_x(I_{xy}I_{yz} - I_{yy}I_{xz}) + R_y(I_{xx}I_{yz} - I_{xy}I_{xz}) - R_z(I_{xx}I_{yy} - I_{xy}^2)]/D.\end{aligned}$$

其中

$$D = I_{xx}(I_{yy}I_{zz} - I_{yz}^2) - I_{xy}(I_{xy}I_{xz} - I_{xz}I_{yz}) + I_{zz}(I_{xy}I_{yz} - I_{yy}I_{zz}).$$

I 和 R 是纯几何因子

$$\begin{aligned}R_x &= \sum_{i=1}^4 (x_i - x_0), & R_y &= \sum_{i=1}^4 (y_i - y_0), & R_z &= \sum_{i=1}^4 (z_i - z_0), \\ I_{xx} &= \sum_{i=1}^4 (x_i - x_0)^2, & I_{yy} &= \sum_{i=1}^4 (y_i - y_0)^2, & I_{zz} &= \sum_{i=1}^4 (z_i - z_0)^2, \\ I_{xy} &= \sum_{i=1}^4 (x_i - x_0)(y_i - y_0), & I_{xz} &= \sum_{i=1}^4 (x_i - x_0)(z_i - z_0), \\ I_{yz} &= \sum_{i=1}^4 (y_i - y_0)(z_i - z_0).\end{aligned}$$

差分格式为

$$\begin{aligned}& \frac{U_{Z_{i,j,k}}^{n+1} - U_{Z_{i,j,k}}^n}{\tau} V_{P_{i,j,k}, P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}, P_{i,j+1,k}} \\ &= \mathbf{S}_{P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}, P_{i,j-1,k}} \cdot \nabla U_{P_{i,j-1,k}, P_{i,j+1,k}, P_{i,j,k+1}}^{n+1} \\ & \quad + \mathbf{S}_{P_{i,j,k+1}, P_{i,j+1,k}, P_{i,j,k}} \cdot \nabla U_{P_{i,j,k}, P_{i,j+1,k}, P_{i,j,k+1}}^{n+1} \\ & \quad + \mathbf{S}_{P_{i,j,k}, P_{i,j-1,k}, P_{i,j,k+1}} \cdot \nabla U_{P_{i,j,k}, P_{i,j-1,k}, P_{i,j,k+1}}^{n+1} \\ & \quad + \mathbf{S}_{P_{i,j,k}, P_{i,j-1,k}, P_{i,j+1,k}} \cdot \nabla U_{P_{i,j,k}, P_{i,j-1,k}, P_{i,j+1,k}}^{n+1}.\end{aligned}$$

离散所得的矩阵是一个非对称的大型的稀疏矩阵, 一般的方法如 CGS 和 Bi-CG 迭代会有不收敛的情况发生. 用 Bi-CGSTAB^[5] 可以很好的解决这个问题. Bi-CGSTAB 方法要做 4 次内积和两次矩阵向量乘积, 存储量为矩阵 +10n. 在局部, 残差向量可以极小化, 这样 Bi-CGSTAB 方法比 CGS, Bi-CG 两种方法有更光滑的收敛性.

§3. 数值试验

考虑下面的问题 [6]:

$$\begin{aligned} u(x, y, z, t)_t - \Delta u(x, y, z, t) &= 0, \quad (x, y, z) \in \Omega = [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1], \\ u(x, y, z, 0) &= 10e^{x+y+z}. \end{aligned} \quad (9)$$

这个问题的解析解为 $u = 10e^{x+y+z+3t}$, 边界条件由解析解给出. 时间步长为 0.005. 整个时间 $T = 0.5$.

在非结构网格 (见图 3) 上进行了数值试验.

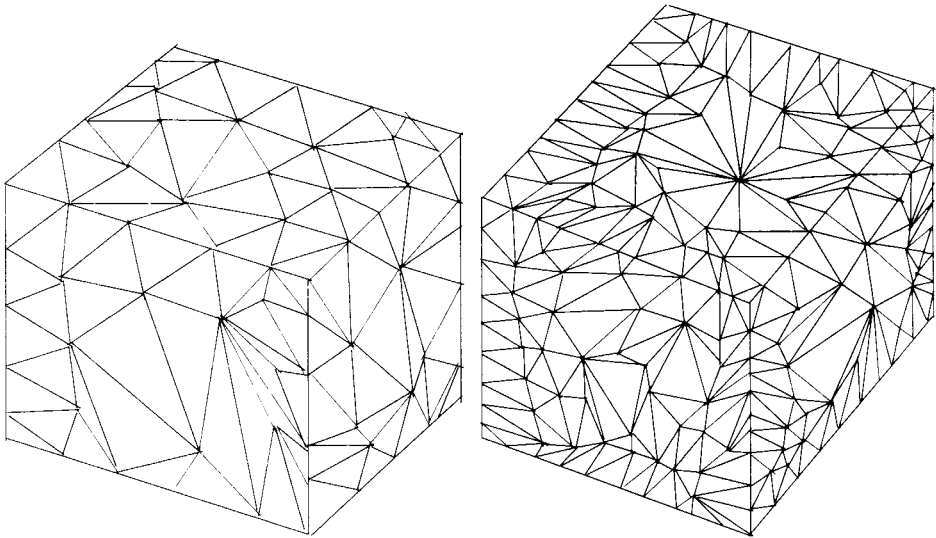


图 3 两种非结构网格

网格具有大变形, 计算结果在表 1 中. 分别得到了极大模, L^2 模和相对误差, 分别定义如下:

极大模误差

$$\max_{i,j,k} |U_{Z_{i,j,k}}^{n+1} - u(x_{Z_{i,j,k}}, y_{Z_{i,j,k}}, z_{Z_{i,j,k}}, t_{n+1})|,$$

而 L^2 误差

$$\left\{ \sum_{i,j,k} |U_{Z_{i,j,k}}^{n+1} - u(x_{Z_{i,j,k}}, y_{Z_{i,j,k}}, z_{Z_{i,j,k}}, t_{n+1})|^2 / N \right\}^{\frac{1}{2}},$$

这里 N 表示网格单元个数.

相对误差

$$\sum_{i,j,k} |U_{Z_{i,j,k}}^{n+1} - u(x_{Z_{i,j,k}}, y_{Z_{i,j,k}}, z_{Z_{i,j,k}}, t_{n+1})| / |u(x_{Z_{i,j,k}}, y_{Z_{i,j,k}}, z_{Z_{i,j,k}}, t_{n+1})|.$$

相应的计算结果在下面的表中.

表 1 非结构网格上两种算法的误差

网格类型	L^2 模	极大模	相对误差
$5 \times 5 \times 5$	0.038434	0.31123	0.02982
$10 \times 10 \times 10$	0.013783	0.05132	0.01326

从计算结果可以看出, 本文方法无论在极大模, L^2 模和相对误差都很小, 在非结构网格上算法的精度接近 2 阶. 方法在选取控制体的时候, 更好的考虑了各个网格点的相对位置, 并利用了守恒性条件, 保证了方法的守恒性, 因而有较高的精度.

§4. 结 论

本论文在二维扩散方程的非结构网格的有限体积法的基础上, 发展了三维扩散方程的非结构四面体面体网格的有限体积差分格式. 取单元中心作为计算节点, 减少了向量和单元体积的计算; 利用通量守恒条件来保证方法的守恒性; 对网格点采用了拉格朗日因子插值法, 更适用于非结构大变形网格的计算. 方法具有精度高, 守恒性好, 网格适应性强等特点, 可以进一步用于对流扩散方程和 Navier-Stokes 方程等的数值模拟.

参 考 文 献

- [1] 陶文铨, 计算传热学的近代进展, 科学出版社, 北京, 2000.
- [2] Palmer T S. Discretizing the diffusion equation on unstructured polygonal meshes in two dimensions, *Annals of Nuclear Energy*, **28**(2001) 1851-1880.
- [3] Fue-Sang Lien. A pressure-based unstructured grid method for all-speed flows. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, **33** (2000) 355-374.
- [4] 李德元, 水鸿寿, 汤敏君, 关于非矩形网格上的二维抛物型方程的差分格式, 数值计算与计算机应用, **4** (1980) 217-224.
- [5] Vander Vorst H A. Bi-CGSTAB: a fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of non-symmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Stat. Com.* **13**:4 (1992) 631- 644.
- [6] Voss D A, Khaliq A Q M. Parallel LOD methods for second order time dependent PDEs. *J. Computers Math. Applic.* **30**:1 (1995) 25-35.
- [7] 陈光南, 李德元, 万正苏, 解三维扩散方程的积分内插格式, 计算物理, **3** (2003) 205-207.