



# 扩散方程保正的有限体积格式

袁光伟, 盛志强, 岳晶岩\*

北京应用物理与计算数学研究所计算物理实验室, 北京 100088

E-mail: yuan\_guangwei@iapcm.ac.cn, sheng\_zhiqiang@iapcm.ac.cn, yue\_jingyan@iapcm.ac.cn

收稿日期: 2011-12-27; 接受日期: 2012-06-07; \* 通信作者

国家自然科学基金(批准号: 11171036)、国防基础科研项目(批准号: B1520110011)和中国工程物理研究院科学技术发展基金(批准号: 2010A0202010)资助项目

**摘要** 在大变形网格上数值求解多介质扩散方程时, 如何构造具有保正性的扩散格式一直是人们关注的难题. 本文将简要综述与保正性相关的扩散格式的研究历史, 并为解决这一难题提出新的设计途径, 构造出新的具有较高精度的单元中心型守恒保正格式, 它们可兼顾网格几何变形和物理量变化. 本文将给出数值实验结果, 验证新格式在变形的网格上保持非负性.

**关键词** 扩散方程 中心型有限体积格式 保正性

**MSC (2010) 主题分类** 65M06, 65M12, 65M55

## 1 引言

### 1.1 研究背景

许多实际的物理系统中包含各种物理量的扩散过程, 例如在受控约束核聚变、油藏模拟、气象预报和天体物理等应用领域中, 需考虑能量传输过程或物质质量扩散过程等. 描述这些物理过程的偏微分方程是非线性扩散方程, 比如聚变物理研究中的电子、离子、光子(三温)热传导方程组, 多群辐射扩散方程组, 以及磁扩散方程等.

对于扩散方程定解问题, 一个重要特性是具有所谓的极值原理, 它包括最大值原理和最小值原理. 扩散方程的解保持非负性(简称为保正性)是指“如果已知数据非负且内部没有汇, 那么解非负”, 即扩散算子具有单调性, 这是最小值原理的一个特殊情形. 其物理意义十分明确, 例如, 对能量传输问题温度非负, 对于质量扩散问题密度非负, 对于多相流问题介质浓度非负. 对于线性扩散问题, 极值原理等价于保正性. 由于扩散方程定解问题的解满足极值原理这一特性, 所以, 在离散情形希望它仍然保持成立, 即离散格式的解满足离散极值原理, 以保证离散解不出现非物理的数值现象. 当离散格式的解具有保正性时, 通常称这样的格式为保正格式或单调格式, 亦称格式具有保正性或单调性(参见 [1,2]).

如果所讨论的离散格式是非线性的, 那么, 离散最大值原理和离散最小值原理不等价(无论扩散问题是线性的还是非线性的). 要求一个格式满足离散极值原理比仅仅要求其保持非负性要严格, 限制性更强, 从而相应的格式设计更难. 我们讨论的扩散问题不仅是非线性的, 还是多介质的, 密度比往往很大. 在实际应用领域, 扩散过程往往与其它物理过程强耦合, 多介质辐射流体力学问题是一个典型的辐射扩散与流体力学耦合的问题, 其数值模拟包括扩散方程的计算与流体力学方程的计算, 且它们的

英文引用格式: Yuan G W, Sheng Z Q, Yue J Y. The finite volume scheme preserving the positivity for diffusion equation (in Chinese). *Sci Sin Math*, 2012, 42(9): 951-970, doi: 10.1360/012011-1041

计算是耦合进行的. 对于多介质辐射流体力学 Lagrange 方法, 计算网格随流体运动, 流体出现大变形时导致网格大变形, 此时需在变形的 Lagrange 网格上求解辐射扩散方程, 这对格式的健壮性提出了很大的挑战. 总之, 在大变形网格上, 针对具有间断系数或各向异性张量系数的扩散方程, 要求设计出一个格式既保持非负性 (或满足离散极值原理)、又保持局部守恒性, 难度较大.

已有的研究表明, 一个违反极值原理或保正性的离散格式至少会导致如下三个问题<sup>[3]</sup>: (1) 具有大时间步长的全隐离散格式的精度较差. (2) 未知量 (例如温度) 的数值解出现虚假的负值, 往往在低温区导致温度出现负值; 在实际计算中, 未知量 (例如温度) 的数值解一旦出现负值, 如果不做处理, 那么整个计算立即中断; 这是因为实际应用中许多扩散问题是非线性的, 其扩散系数是未知量的非线性函数, 该函数仅仅对非负的物理量才有定义. 另外, 在辐射流体力学的热传导计算中出现负的温度时, 会使声速变为虚数, 同样导致计算无法进行下去. 如果对出负的值进行处理, 而处理不合理的话, 那么计算精度通常会降低. 目前, 实际应用中通常采取诸如“遇负置零”的人为处理方式, 即将负的温度替换成初始温度, 使得程序能继续计算下去. 这种简单的非负性修正方法对于保证计算不中断是有效的, 但显然其结果是破坏解的守恒性, 对于长时间计算, 会损失离散解的精度, 导致计算所得的物理图像偏离真实情况. (3) 即使在不出现计算出负的情形, 当网格变形较大时, 采用不保正的格式, 数值结果通常会出现非物理振荡, 即“过跳”和“低亏”. 对于热传导问题, 它会破坏热力学第二定律, 引起热量从低温流往高温, 在温度变化剧烈的区域出现非物理振荡.

## 1.2 对扩散格式的要求

为保证数值模拟具有所需的置信度, 扩散格式应尽可能多地保持物理模型的特性, 或者说偏微分方程定解问题的特性. 特别地, 这里将扩散格式应满足的一些重要特性总结如下: (1) 格式满足离散极值原理, 对线性方程即为保正性; 针对非线性扩散方程, 在非线性迭代过程中每一步均保正; (2) 局部守恒性, 即越过网格边的离散法向流是唯一定义好的; 在热传导情形, 守恒的扩散方程对应于热力学第一定律; (3) 适用于不同类型的网格, 包括结构四边形与非结构多边形网格; 适用于不同特性的扩散系数问题的离散求解, 包括各向同性的标量系数和非均匀的全张量扩散系数问题, 光滑的和间断的扩散系数问题等; (4) 在严重扭曲的网格上有所需精度, 无论网格是否光滑, 随着网格加密, 数值解收敛到精确解; 对光滑解有高于一阶的精度; (5) 基本未知量 (自由度) 个数尽可能少, 离散模板尽可能小, 具有局部模板; 在扭曲四边形网格上简化为九点格式, 甚至五点格式; 在 (正交) 矩形网格上对各向同性扩散问题简化为标准的五点格式; (6) 基本未知量只有定义于单元中心的未知量, 以适应与 Lagrange 流体力学的耦合计算, 并且在随流体运动而高度扭曲的网格上, 扩散格式应该足够精确和健壮; 即使在还有网格单元边未知量情形, 也只有单元中心未知量出现在离散的时间导数项和吸收项中; (7) 对间断的处理是严格的, 以适应与多介质流体问题的耦合计算; 在矩形网格上对间断系数的处理等价于熟知的调和平均方法; (8) 保持球几何对称性, 以适用于激光靶丸 (小囊) 内爆计算; (9) 格式是线性准确的<sup>[4,5]</sup>, 例如在  $x-y$  和  $r-z$  几何情形分别保持齐次线性解  $a+bx+cy$ ,  $a+br+cz$ ; 或者说, 离散梯度算子和离散散度算子作用于常值函数分别得到零向量和零标量, 离散 Laplace 算子作用于线性函数等于零; 在 [3] 中将扩散算子作用于常数上等于零的性质称为“微分性”, 并指出在热传导情形, 该性质等价于热力学第零定律; (10) 离散梯度算子和离散散度算子保持连续算子的积分恒等式在离散情形仍然成立<sup>[6]</sup>, 此时在由扩散系数的逆加权定义的内积下, 离散流算子是离散散度算子的负伴随算子; (11) 扩散格式形成的代数方程组的系数矩阵是对称正定的; 在 [3] 中指出扩散算子是正定的, 且在热传导情形正定性等价于热力学第二定律; (12) 扩散格式具有内在的并行本性, 适应于大规模并行计算

机, 只需局部通讯 (参见 [7]).

本文内容如下. 第 2 节将简要叙述扩散格式解的保正性的研究现状. 第 3 节针对任意凸多边形网格提出一类新的单元中心型有限体积保正格式, 并且, 特别对四边形网格给出一类新的保正格式. 第 4 节给出数值结果说明格式的精度和保正性. 最后, 第 5 节是一个小结.

## 2 研究现状

### 2.1 保正性研究历史简述

众所周知, 对于一维扩散问题标准的三点差分格式是保正的, 对于二维矩形网格上具有标量扩散系数的问题, 标准的五点差分格式是保正的, 在 Voroni 网格 (见 [8]) 或更一般的可容许网格 (即具有“相邻网格单元中心连线与它们的公共边垂直”性质的网格, 定义见 [9]) 上, 标准的单元中心型有限体积格式是保正的.

然而, 对于二维矩形网格上各向异性的张量扩散系数问题, 以及非矩形网格上 (无论系数是标量还是张量) 的扩散问题, 许多离散格式不具有保正性, 就我们所知, 在四边形网格情形, 没有一个线性的相容的九点有限体积格式满足最大值原理或最小值原理. 已有的研究工作表明, 在大变形结构四边形网格上九点格式<sup>[10]</sup>、Kershaw 格式<sup>[11]</sup>、MDHW 格式<sup>[4]</sup> 等均不具有保正性. 在一般的三角形网格 (包含钝角三角形) 或强各向异性多边形网格上, 二阶线性方法例如支撑算子 (SOM) 或拟态有限差分 (MFD) 格式<sup>[6, 12]</sup>、多点通量逼近 (MPFA) 格式<sup>[13–16]</sup> 等都不保正, 更不满足离散极值原理. 已有文献中提出, 需要对网格几何或扩散系数添加较为严格的限制条件, 以保证其中一些格式具有保正性 (参见 [4, 11, 13, 17–27]).

为保证分片线性有限元方法的离散极值原理成立, Ciarlet 和 Raviart 在 [28] 中给出了对网格限制的充分条件 (锐角条件), 后来, 在 [21] 和 [29] 中提出了较弱的网格条件. 在 [30] 中针对反应扩散方程, 给出单纯形网格上线性有限元方法的离散极值原理成立的充分条件, 将 [28] 中的条件变成显式可验证的条件, 它由空间维数、单纯形网格二面角和高、以及反应系数的大小给出, 数值实验表明, 该条件是精确的, 明显改进了 [28] 中给出的一个类似的条件. 在 [31] 中考察了混杂非结构网格上线性抛物问题的离散极值原理, 给出了对于时间步长的较为苛刻的限制条件. 在 [32] 中讨论了高维抛物初边值问题线性有限元, 给出了保证离散极值原理的网格几何条件和时间步长条件. 在 [33] 中对某些具有混合边界条件的非线性椭圆问题的有限元解证明了离散极值原理, 其中考虑了用于刚度矩阵构造的数值求积法则的效应. 在 [19] 中简要回顾了有限元方法离散极值原理有关的主要结果. 在 [34] 中针对一般的线性抛物方程空间双线性元离散, 给出了保证离散极值原理成立的充分条件. 在 [35] 中分析了反应扩散方程菱柱有限元的离散极值原理, 推导了能保证其成立的菱柱剖分的形状参数的几何条件, 并在 [36] 中将其推广到非定常方程的情形, 给出了网格形状参数的几何条件和时间步长的约束条件. 最近, 在 [37] 中对拟线性二阶椭圆方程推导了  $P_1$  协调元的离散极值原理, 其中网格满足  $O(h^\alpha)$  锐角条件, 即对三角形的每个角  $\alpha_{ij}$  或对四面体的内部二面角  $\alpha_{ij}$  要求满足  $\alpha_{ij} \leq \pi/2 - \gamma h^\alpha$ , 其中  $\alpha \geq 0, \gamma > 0$ .

Nordbotten 等在 [16] 中推导了四边形网格上有限体积方法的单调性 (即保正性) 准则, 网格须满足较苛刻的限制条件, 证明了不可能构造线性的九点格式, 既无条件满足单调性准则, 同时又满足局部守恒性和保持线性准确. Lipnikov 等在 [12] 中对二维和三维网格上拟态 (mimetic) 有限差分 (MFD) 方法研究了保证单调性的充分条件, 由这些条件得到一组关于网格单元的质量矩阵的元素的一般的不等式. 在 [38] 中讨论了抛物和椭圆算子离散的和连续的最大值原理, 阐述了离散抛物最大值原理

(DPMP)、离散椭圆最大值原理 (DEMP) 和离散稳定化性质 (DSP) 之间的关系, 得到的主要结果是 DPMP 蕴涵 DSP 和 DEMP.

不少研究论文中指出扩散方程保正格式的研究与设计是一个重要且困难的问题. 例如, Lipnikov 等在 [1] 中指出“单调性是最难满足的要求”; Sharma 等在 [25] 中称“温度的正性对数值健壮性绝对是必需的”; Kuzmin 等在 [22] 中指出“单调性约束在离散层次上难以满足”; Nakshatrala 等在 [39] 中指出“众所周知, 经典的有限元 (例如单场 Galerkin 有限元, Raviart-Thomas 有限元, 变分多尺度有限元, 与 Galerkin- 最小二乘混合有限元) 不能给出非负解, ..., 在非结构网格上使用数值方法 (有限元, 有限体积或有限差分) 得到非负解不是一件容易的事”; Droniou 和 Potier 在 [40] 中也指出“最大和最小值原理是难以满足的, 因此在构造有限体积格式时很少考虑; 但是它们是相当重要的”. 在 [31] 中指出“在计算机模拟中保持数学模型解的数量特征, 例如极值原理, 是关键的要求之一”.

## 2.2 保正性研究进展简述

鉴于大变形网格上扩散格式解的保正性在数值求解中的重要性, 多年来尤其是近年来, 国内外不少学者对扩散方程单调的或具有保正性的离散格式开展了研究工作. 所取得的研究进展可以分为两个方面: 一是构造新的具有保正性的守恒格式; 二是对现有格式采用所谓的前、后处理方法. 即在现有格式的基础上进行修正, 或者引入限制子, 对离散流表达式进行适当的 (符合物理的) 限制; 或者引入约束变分泛函, 采用约束优化技术求解, 这类技术途径统称为前处理方法. 还有一类技术途径是, 当采用已有的格式求解出现计算出负时, 设计某种类似于“遇负置零”的方法, 对出负的解进行某种修补, 特别地针对变化剧烈的高温辐射热传导问题, 将负值置为某个正的小常数 (即初始的室温), 我们称其为后处理方法. 下面简要地介绍这两方面研究中的部分工作.

### 2.2.1 保正格式的研究

Burman 等在 [41] 中研究了 Laplace 方程经典的线性  $P_1$  有限元的非线性修正, 它的解满足离散极值原理而无需对网格添加较强的几何限制条件, 例如无需锐角条件成立, 但即使对简单的线性问题, 该离散格式变成非线性的, 且不清楚该格式的近似解是否唯一, 也未考虑各向异性张量. Bertolazzi 等在 [42] 中对光滑齐次的定常对流 (各向同性) 扩散方程, 提出了一个单纯形非结构网格上的单元中心型有限体积方法, 利用非线性策略定义了扩散流离散化时需要的面梯度, 但该方法仅在限制性几何约束条件下得到保正性. 2005 年 Le Potier 在 [43] 中对二维非结构三角形网格上强各向异性扩散问题, 提出了一个非线性单元中心型有限体积格式, 对具有充分小时间步长的抛物问题它是单调的, 满足最大值或最小值原理, 但两者不能同时满足.

Lipnikov 等在 [1] 中对椭圆问题进一步分析和发展了 Le Potier 的格式, 构造了任意三角形网格上具有保正性的非线性格式. 该格式存在的问题是, 与通常将单元中心量定义在单元的几何中心的做法不同, 它要求定义网格单元中心未知量的位置不仅依赖于网格, 还与扩散系数相关, 这一限制条件导致该格式不便于应用于与流体力学的耦合计算. 在辐射流体力学计算中, 扩散格式中的未知量的定义位置通常是由流体力学计算决定的, 对于单元中心型离散方法, 热力学量一般定义于网格单元的几何中心. 如果由于扩散计算的需要而改变单元中心未知量的定义位置, 那么需要进行物理量重映, 这不仅增加计算量, 而且带来精度损失. 并且在任意四 (多) 边形网格上不能保证 [1] 中格式是单调的, 在任意多边形网格上它需增加形状正则等条件, 对网格需进行人为处理.

针对上述计算格式的问题, 在 [44] 中提出了任意 (星形) 多边形网格上扩散方程具有保正性的计

算格式, 克服了上述缺点, 无需对多边形的形状正则性添加限制条件, 也无需对定义单元中心未知量的位置施加较强的限制, 可直接适用于与流体力学耦合的总体计算, 改进和推广了 Lipnikov 等在 [1] 中所提出的任意三角形网格上的格式. 构造该格式的主要的想法是, 在推导法向流的离散表达式时, 根据网格的几何变形特点, 来选取适当的单元边及该边节点处未知量作为离散模板, 保证在任意 (星形) 多边形网格上具有保正性. 在 [45] 中已将该格式推广应用于非线性非平衡辐射扩散方程组的求解. 所构造的格式符合以下要求: 具有局部守恒性和保正性, 适用于无结构各向异性网格, 适用于非均匀全扩散张量, 所得到的稀疏代数方程组有尽可能少的非零元, 求解效率较高, 对光滑解有高于一阶的精度, 守恒误差较小. 在 [44] 和 [45] 中所构造的格式采用了自适应选取离散模板的技术途径, 能够很好地适应各种大变形的网格. 但是, 当网格变形很大时, 例如当单元中心在网格边上的正交投影位于网格边的延长线上时, 在该条网格边上的离散法向流表达式中, 可能不出现该网格边上的物理量, 在这种情形, 该保正格式虽然很好地适应了网格的几何变形, 却未能直接反映该网格边上的物理量变化. 本文的目标就是提出解决该方法的方法.

在 [46] 中, 基于非线性两点流逼近方法并采用 [44] 中提出的法向向量保正分解方法, 构造了多边形网格上扩散方程无需插值的保正格式. 在 [47] 中对定常对流扩散方程提出了新的二阶保正格式, 其中扩散项的离散与 [46] 中的相同, 对流项的近似基于一个特别设计的极小非线性修正的二阶迎风方法. 在 [48] 中综合 [44] 和 [47] 的方法提出了对流扩散方程的保正格式.

2009 年 Le Potier 在 [49] 中利用非线性格式计算梯度, 提出了二维三角形网格上各向异性扩散方程的非线性格式, 它无需对网格的几何约束以及对各向异性比的限制性条件, 可同时保持离散最大值和最小值原理. 在 [40] 中给出了扩散方程一个具有特定结构的离散格式, 该结构保证局部离散极值原理成立, 数值解不出现虚假振荡, 并证明了在强制性假定下其解收敛到扩散方程的解, 这有助于指导如何选取方法中的参数, 以得到较好的近似解. 在 [50] 中构造了多边形网格上满足离散极值原理的守恒格式, 发展了 [44] 中对离散流进行适当非线性组合的方法.

### 2.2.2 前、后处理方法研究

Nordbotten 等在 [51] 中通过使用其它的相互作用区域, 改进了在四边形网格上多点通量逼近方法的非负性, 即增加单调性区域. Hoteit 等在 [52] 中针对求解扩散问题的混合 - 混杂有限元方法 (MH-FEM), 研究了如何避免违背离散极值原理的方法, 提出了两种将 MHFEM 转化为满足离散极值原理的有限差分方法的技术途径. Mlacnik 等在 [53] 中对各向异性问题采用网格优化的方法来改进 MPFA 格式解的单调性. Sharma 等在 [25] 中针对正交网格上非定常各向异性热传导方程显式格式, 给出测试算例表明基于 (对称和反对称) 中心差分的算法均不保持单调性, 在温度变化大的区域计算出负, 并借鉴双曲守恒律方程二阶格式中使用的限制子方法, 提出了基于斜率限制子的避免温度出负的方法. 随后在 [54] 中将该限制子方法推广应用于方向分裂的半隐格式, 给出了时间步长可放大且温度振荡小的计算结果. Kuzmin 等在 [22] 中针对各向异性扩散问题研究了满足离散极值原理的受限有限元方法, 它是一类基于前处理方式的非负性修正格式.

Liska 等在 [55] 中对二维三角形网格上一般自伴椭圆方程的线性有限元方法, 讨论了如何强制其满足离散极值原理的两条技术途径. 第一条技术途径是基于保持整体能量守恒的局部修补技术, 它是离散解的后验修正, 但它不能保持局部守恒性. 另一条技术途径是基于约束变分优化的方法, 这要求解一个与变分形式的椭圆边值问题相关的凸二次规划问题, 其计算量大, 守恒性有待研究. 最近, 在 [56] 中将局部修补技术应用于九点格式的求解, 该技术同样适用于任意多边形网格上的菱形格式, 并进一步发展成保持整体守恒性的整体修补技术. 在 [57] 中针对非线性扩散方程九点格式的求解, 提

出了能保持局部守恒性的非负性修正方法.

近年来, 基于约束优化的求解方法得到了进一步的发展和应用. 在 [39] 中 Nakshatrala 等讨论了张量扩散方程混合有限元的非负解, 基于约束优化技术给出两个非负的混合有限元形式, 一个基于 Raviart-Thomas 空间, 另一个基于变分多尺度形式, 它们在变形网格上对低阶 (线性、双线性、三线性) 有限元给出非负数值解, 但前一个形式由于非负约束会出现守恒性损失. Nagarajan 等<sup>[58]</sup> 将优化技术推广应用于任意网格上带衰减的扩散方程, 给出了一个非负性限制和强制极值原理成立的方法. Angelini 在 [59] 中提出了一个在损失单调性的地方局部地减少离散解的曲率的方法. 就我们所知, 上述基于约束优化的方法以及基于修正的技术均不能保证守恒性严格成立. Pal 和 Edwards 在 [60] 中引入了新的流分裂非线性策略, 以保证所设计的流连续局部守恒的有限体格式不出现虚假振荡. 在 [61] 中采用约束凸优化方法, 对变分多尺度方法给出了一个强制最大值原理和守恒性约束成立的理论框架.

总之, 大变形网格上具有保正性的或保持离散极值原理的扩散格式研究是一个得到人们广泛关注的重要的研究课题, 是许多实际应用问题数值模拟中迫切需要解决的困难问题. 本文研究解决的问题就是, 设计出既适应网格几何大变形, 同时兼顾该网格边上物理量变化的保正格式.

### 3 非线性保正格式的构造

#### 3.1 问题描述

考虑以下定常扩散方程的定解问题:

$$-\nabla \cdot (\kappa \nabla u) = f, \quad \text{在 } \Omega \text{ 内部}, \quad (3.1)$$

$$u(x) = g, \quad \text{在 } \partial\Omega \text{ 上}, \quad (3.2)$$

其中  $\Omega$  是一个有界多边形区域,  $\partial\Omega$  是区域边界,  $\kappa$  是扩散系数.

将区域  $\Omega$  剖分为凸多边形网格. 网格单元用  $K$  或  $L$  表示, 同时用  $K$  或  $L$  表示网格中心. 网格顶点用  $A, B$  或  $P_1, P_2, P_3, P_4, \dots$  表示, 网格边中点用  $M_1, M_2, M_3, M_4, \dots$  表示, 网格边记为  $\sigma$ ,  $\mathcal{E}_K$  表示网格  $K$  的边的集合. 用  $\vec{n}_{K\sigma}$  (或  $\vec{n}_{L\sigma}$ ) 表示网格  $K$  (或  $L$ ) 在其网格边  $\sigma$  上的单位外法向量, 显然成立  $\vec{n}_{K\sigma} = -\vec{n}_{L\sigma}$ . 记  $\vec{t}_{KP_i}$  和  $\vec{t}_{KM_i}$  分别为线  $KP_i$  和  $KM_i$  上的单位切向量.

在网格单元  $K$  上积分方程 (3.1) 得

$$\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{K,\sigma} = \int_K f(x) dx, \quad (3.3)$$

其中网格边  $\sigma$  上的连续法向流为

$$\mathcal{F}_{K,\sigma} = - \int_{\sigma} \kappa(x) \nabla u(x) \cdot \vec{n}_{K\sigma} dl. \quad (3.4)$$

下面我们将给出连续法向流的离散表达式.

#### 3.2 格式 1: 多边形网格上的保正格式

在本小节中假定网格是任意凸多边形网格. 从  $K$  点发出的射线沿  $\vec{n}_{K\sigma}$  的方向必定与边  $\sigma$  或  $\sigma$  的延长线相交, 交点记为  $O_1$  (见图 1 至 3). 类似地, 从  $L$  点发出的射线沿  $\vec{n}_{L\sigma}$  的方向必定与边  $\sigma$  或  $\sigma$  的延长线相交, 交点记为  $O_2$ . 令  $\theta_{K_1}$  为  $KM_1$  和  $KO_1$  之间的夹角,  $\theta_{K_2}$  为  $KO_1$  和  $KM_2$  之间的夹角,  $\theta_{L_1}$

为  $LM_3$  和  $LO_2$  之间的夹角,  $\theta_{L_2}$  为  $LO_2$  和  $LM_4$  之间的夹角. 记  $\theta_K = \theta_{K_1} + \theta_{K_2}$  和  $\theta_L = \theta_{L_1} + \theta_{L_2}$ , 即  $\theta_K$  为  $KM_1$  和  $KM_2$  之间的夹角,  $\theta_L$  为  $LM_3$  和  $LM_4$  之间的夹角. 显然成立

$$0 \leq \theta_{K_1}, \theta_{K_2}, \theta_{L_1}, \theta_{L_2} < \pi,$$

和

$$0 < \theta_K, \theta_L < \pi.$$

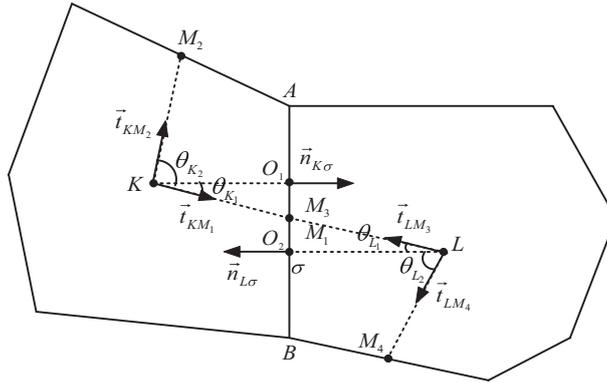


图 1 格式 1 的设计模板 1

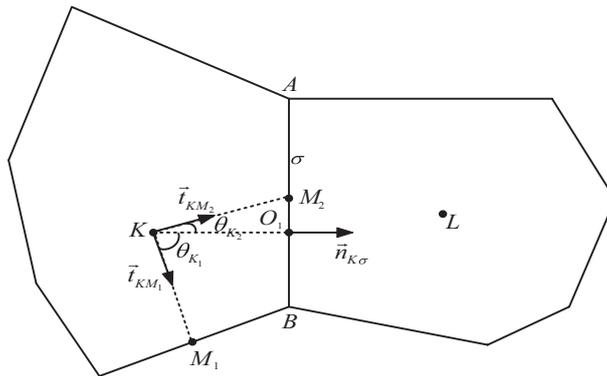


图 2 格式 1 的设计模板 2

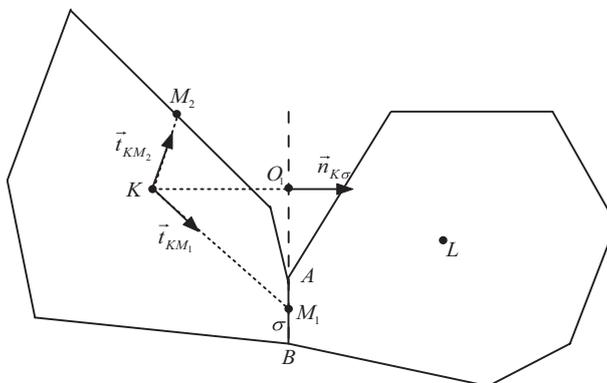


图 3 格式 1 的设计模板 3

由于  $KM_1$  和  $KM_2$  是三角形  $KM_1M_2$  的两条边, 从而有

$$\vec{n}_{K\sigma} = \frac{\sin \theta_{K_2}}{\sin \theta_K} \vec{t}_{KM_1} + \frac{\sin \theta_{K_1}}{\sin \theta_K} \vec{t}_{KM_2}. \quad (3.5)$$

类似地, 有

$$\vec{n}_{L\sigma} = \frac{\sin \theta_{L_2}}{\sin \theta_L} \vec{t}_{LM_3} + \frac{\sin \theta_{L_1}}{\sin \theta_L} \vec{t}_{LM_4}. \quad (3.6)$$

将 (3.5) 代入 (3.4) 得

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{K,\sigma} &= - \int_{\sigma} \kappa(x) \left( \frac{\sin \theta_{K_2}}{\sin \theta_K} \nabla u(x) \cdot \vec{t}_{KM_1} + \frac{\sin \theta_{K_1}}{\sin \theta_K} \nabla u(x) \cdot \vec{t}_{KM_2} \right) dl \\ &= -\kappa(K)|\sigma| \left( \frac{\sin \theta_{K_2}}{\sin \theta_K} \frac{u(M_1) - u(K)}{|KM_1|} + \frac{\sin \theta_{K_1}}{\sin \theta_K} \frac{u(M_2) - u(K)}{|KM_2|} \right) + O(h^2). \end{aligned}$$

类似地, 有

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{L,\sigma} &= - \int_{\sigma} \kappa(x) \left( \frac{\sin \theta_{L_2}}{\sin \theta_L} \nabla u(x) \cdot \vec{t}_{LM_3} + \frac{\sin \theta_{L_1}}{\sin \theta_L} \nabla u(x) \cdot \vec{t}_{LM_4} \right) dl \\ &= -\kappa(L)|\sigma| \left( \frac{\sin \theta_{L_2}}{\sin \theta_L} \frac{u(M_3) - u(L)}{|LM_3|} + \frac{\sin \theta_{L_1}}{\sin \theta_L} \frac{u(M_4) - u(L)}{|LM_4|} \right) + O(h^2). \end{aligned}$$

在以上两个表达式中出现了网格边未知量, 我们可以用相邻的两个网格顶点未知量的值来近似它, 即  $u(M_1) = 0.5(u(P_1) + u(P_2)) + O(h^2)$ , 见图 4. 用网格顶点未知量替换网格边未知量以后, 以上两个表达式可以改写为

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{K,\sigma} &= -\kappa(K)|\sigma| \left( \frac{\sin \theta_{K_2}}{\sin \theta_K} \frac{0.5(u(P_1) + u(P_2)) - u(K)}{|KM_1|} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\sin \theta_{K_1}}{\sin \theta_K} \frac{0.5(u(P_3) + u(P_4)) - u(K)}{|KM_2|} \right) + O(h^2), \\ \mathcal{F}_{L,\sigma} &= -\kappa(L)|\sigma| \left( \frac{\sin \theta_{L_2}}{\sin \theta_L} \frac{0.5(u(P_5) + u(P_6)) - u(L)}{|LM_3|} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\sin \theta_{L_1}}{\sin \theta_L} \frac{0.5(u(P_7) + u(P_8)) - u(L)}{|LM_4|} \right) + O(h^2). \end{aligned}$$

现在比较一下新格式与已有单调格式的差别. 在 [44] 中使用的模板如图 5, 这意味着在离散边  $\sigma$  上的法向流的时候, 用到的网格顶点是  $P_1$  和  $P_2$ , 而  $P_1$  和  $P_2$  与边  $\sigma$  没有关系. 这样得到的格式未能直接反映该网格边  $\sigma$  上的物理量变化, 显然是不太合理的. 而新格式用到了 4 个网格顶点 (见图 4), 当前网格边物理量的变化总能反映在离散法向流的表达式中, 这样的设计更为合理.

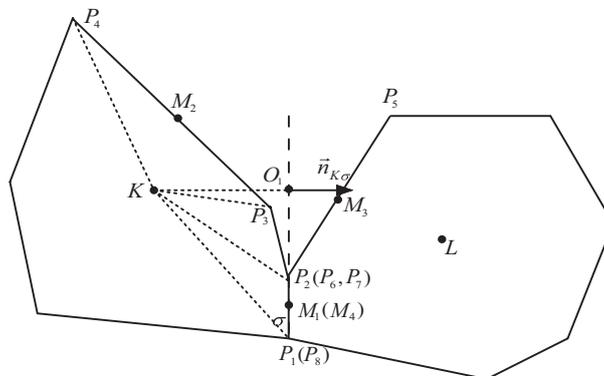


图 4 格式 1 的模板

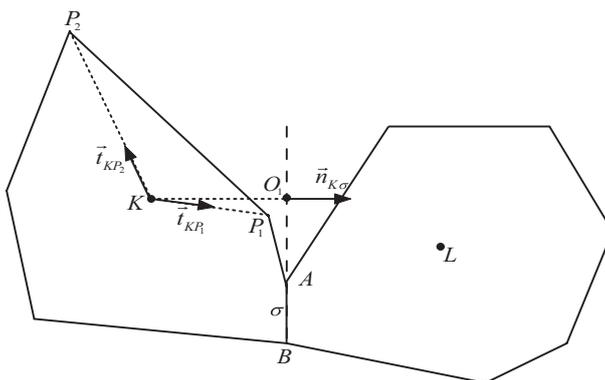


图 5 [44] 中单调格式的模板

记

$$F_1 = -\kappa(K)|\sigma| \left( \frac{\sin \theta_{K_2}}{\sin \theta_K} \frac{0.5(u_{P_1} + u_{P_2}) - u_K}{|KM_1|} + \frac{\sin \theta_{K_1}}{\sin \theta_K} \frac{0.5(u_{P_3} + u_{P_4}) - u_K}{|KM_2|} \right), \quad (3.7)$$

$$F_2 = -\kappa(L)|\sigma| \left( \frac{\sin \theta_{L_2}}{\sin \theta_L} \frac{0.5(u_{P_5} + u_{P_6}) - u_L}{|LM_3|} + \frac{\sin \theta_{L_1}}{\sin \theta_L} \frac{0.5(u_{P_7} + u_{P_8}) - u_L}{|LM_4|} \right). \quad (3.8)$$

我们将边  $\sigma$  上的离散法向流定义为

$$F_{K,\sigma} = \mu_1 F_1 - \mu_2 F_2, \quad (3.9)$$

$$F_{L,\sigma} = -\mu_1 F_1 + \mu_2 F_2, \quad (3.10)$$

其中  $\mu_1 + \mu_2 = 1$ . 将 (3.7) 和 (3.8) 代入 (3.9) 得

$$\begin{aligned} F_{K,\sigma} = & \mu_1 \frac{\kappa(K)|\sigma|}{\sin \theta_K} \left( \frac{\sin \theta_{K_2}}{|KM_1|} + \frac{\sin \theta_{K_1}}{|KM_2|} \right) u_K - \mu_2 \frac{\kappa(L)|\sigma|}{\sin \theta_L} \left( \frac{\sin \theta_{L_2}}{|LM_3|} + \frac{\sin \theta_{L_1}}{|LM_4|} \right) u_L \\ & - \mu_1 \frac{\kappa(K)|\sigma|}{2 \sin \theta_K} \left( \frac{\sin \theta_{K_2}}{|KM_1|} (u_{P_1} + u_{P_2}) + \frac{\sin \theta_{K_1}}{|KM_2|} (u_{P_3} + u_{P_4}) \right) \\ & + \mu_2 \frac{\kappa(L)|\sigma|}{2 \sin \theta_L} \left( \frac{\sin \theta_{L_2}}{|LM_3|} (u_{P_5} + u_{P_6}) + \frac{\sin \theta_{L_1}}{|LM_4|} (u_{P_7} + u_{P_8}) \right). \end{aligned} \quad (3.11)$$

为了得到两点流近似, 以上表达式的第 3 和 4 项应该消失. 从而, 我们要求  $\mu_1$  和  $\mu_2$  满足以下关系:

$$\begin{cases} \mu_1 + \mu_2 = 1, \\ -a_1 \mu_1 + a_2 \mu_2 = 0, \end{cases} \quad (3.12)$$

其中

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{\kappa(K)|\sigma|}{2 \sin \theta_K} \left( \frac{\sin \theta_{K_2}}{|KM_1|} (u_{P_1} + u_{P_2}) + \frac{\sin \theta_{K_1}}{|KM_2|} (u_{P_3} + u_{P_4}) \right), \\ a_2 &= \frac{\kappa(L)|\sigma|}{2 \sin \theta_L} \left( \frac{\sin \theta_{L_2}}{|LM_3|} (u_{P_5} + u_{P_6}) + \frac{\sin \theta_{L_1}}{|LM_4|} (u_{P_7} + u_{P_8}) \right). \end{aligned}$$

如果  $a_1 + a_2 \neq 0$ , 则有

$$\mu_1 = \frac{a_2}{a_1 + a_2}, \quad \mu_2 = \frac{a_1}{a_1 + a_2}. \quad (3.13)$$

如果  $a_1 + a_2 = 0$ , 则取

$$\mu_1 = \mu_2 = \frac{1}{2}.$$

从  $\theta_{K_1}, \theta_{K_2}, \theta_{L_1}, \theta_{L_2}, \theta_K$  和  $\theta_L$  的定义, 我们知道

$$\sin \theta_{K_1} \geq 0, \quad \sin \theta_{K_2} \geq 0, \quad \sin \theta_{L_1} \geq 0, \quad \sin \theta_{L_2} \geq 0,$$

以及

$$\sin \theta_K > 0, \quad \sin \theta_L > 0.$$

只要

$$u_{P_i} \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, \quad (3.14)$$

就有

$$a_1 \geq 0, \quad a_2 \geq 0,$$

这意味着

$$\mu_1 \geq 0, \quad \mu_2 \geq 0.$$

由 (3.11) 和 (3.12) 可得

$$F_{K,\sigma} = A_{K,\sigma} u_K - A_{L,\sigma} u_L, \quad (3.15)$$

其中

$$A_{K,\sigma} = \mu_1 \frac{\kappa(K)|\sigma|}{\sin \theta_K} \left( \frac{\sin \theta_{K_2}}{|KM_1|} + \frac{\sin \theta_{K_1}}{|KM_2|} \right),$$

$$A_{L,\sigma} = \mu_2 \frac{\kappa(L)|\sigma|}{\sin \theta_L} \left( \frac{\sin \theta_{L_2}}{|LM_3|} + \frac{\sin \theta_{L_1}}{|LM_4|} \right).$$

显然有

$$A_{K,\sigma} \geq 0, \quad A_{L,\sigma} \geq 0.$$

$\sigma$  为边界网格边的情形可以类似处理, 参见 [44, 45]. 并且对于 Neumann 和 Robin 边界条件, 可以类似于 [44, 45] 中的方法给出保正格式的构造.

从而, 我们获得如下的有限体积格式:

$$\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} F_{K,\sigma} = f_K m(K), \quad \forall K \in \mathcal{J}, \quad (3.16)$$

$$u_{P_i} = g_{P_i}, \quad \forall P_i \in \partial\Omega, \quad (3.17)$$

其中  $f_K = f(K)$ .

易见, 离散法向流表达式中的系数非线性依赖于网格顶点未知量, 因此格式是非线性的. 顶点未知量的值可由网格中心未知量的值来近似, 参见 [62] 和 [63]. 对于以上格式, 采用 [44] 中的方法可以证明它是保正的.

### 3.3 格式 2: 四边形网格上的保正格式

考虑四边形网格的如下性质: 网格单元 (几何) 中心点是对边中点连线的交点 (见图 6). 下面利用四边形网格的这一特性设计具有保正性的格式, 使得当前网格边物理量直接出现在离散法向流的表达式中, 且格式模板相对固定.

从  $K$  点发出的射线沿  $\vec{n}_{K\sigma}$  的方向必定与边  $\sigma$  或  $\sigma$  的延长线相交, 交点记为  $O_1$  (见图 7-9). 类似地, 从  $L$  点发出的射线沿  $\vec{n}_{L\sigma}$  的方向必定与边  $\sigma$  或  $\sigma$  的延长线相交, 交点记为  $O_2$ . 对于两个向量  $\vec{a} = (a_1, b_1), \vec{b} = (b_1, b_2)$ , 定义  $\vec{a} \odot \vec{b} = a_1 b_2 - a_2 b_1$ . 交点  $O_1$  的位置可以分为三种情形:

- (1) 交点位于边  $\sigma$  内部 (图 7), 即  $\vec{t}_{KB} \odot \vec{n}_{K\sigma} > 0, \vec{n}_{K\sigma} \odot \vec{t}_{KA} > 0$ . 取  $S_1 = B, S_2 = A$ ;
  - (2) 交点位于边  $\sigma$  的延长线上, 且  $\vec{t}_{KB} \odot \vec{n}_{K\sigma} > 0, \vec{n}_{K\sigma} \odot \vec{t}_{KA} < 0$  (图 8). 取  $S_1 = \frac{3A+B}{4}, S_2$  为  $\sigma$  的对边中点,  $u_{S_1} = \frac{3u_A+u_B}{4}, u_{S_2} = \frac{u_{P_1}+u_{P_2}}{2}$ ;
  - (3) 交点位于边  $\sigma$  的延长线上, 且  $\vec{t}_{KB} \odot \vec{n}_{K\sigma} < 0, \vec{n}_{K\sigma} \odot \vec{t}_{KA} > 0$  (图 9). 取  $S_1$  为  $\sigma$  的对边中点,  $S_2 = \frac{A+3B}{4}, u_{S_1} = \frac{u_{P_1}+u_{P_2}}{2}, u_{S_2} = \frac{u_A+3u_B}{4}$ .
- 类似地,  $O_2$  的位置也可以分为三种情形, 可以同样确定  $S_3, S_4$ .

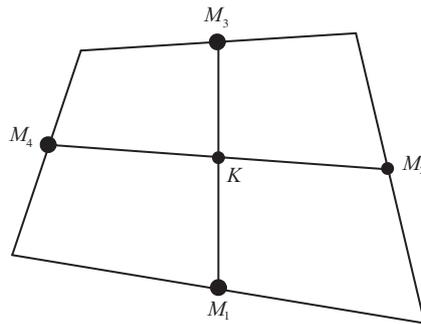


图 6 四边形网格中心点示意图

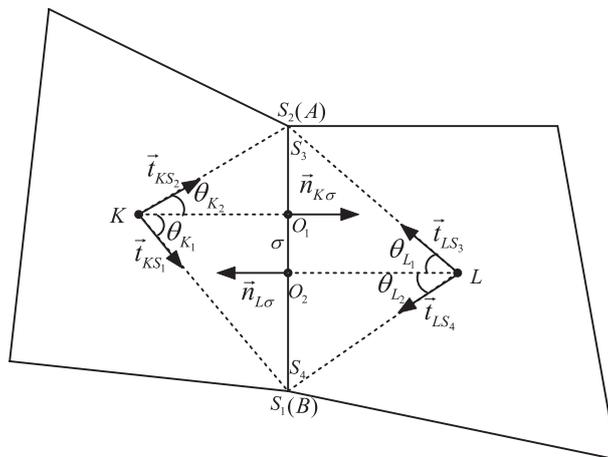


图 7 格式 2 的设计模板 1

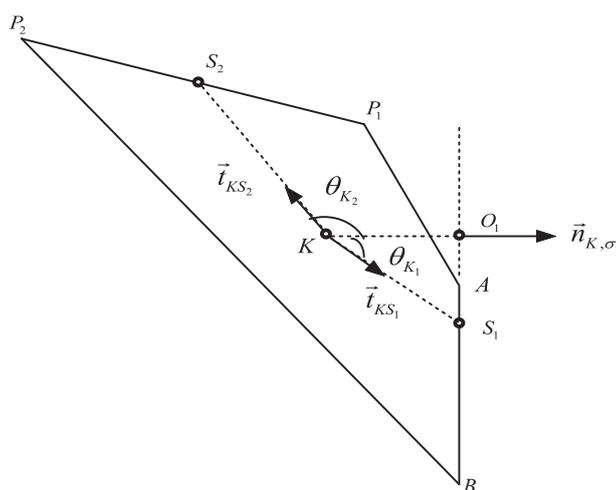


图 8 格式 2 的设计模板 2

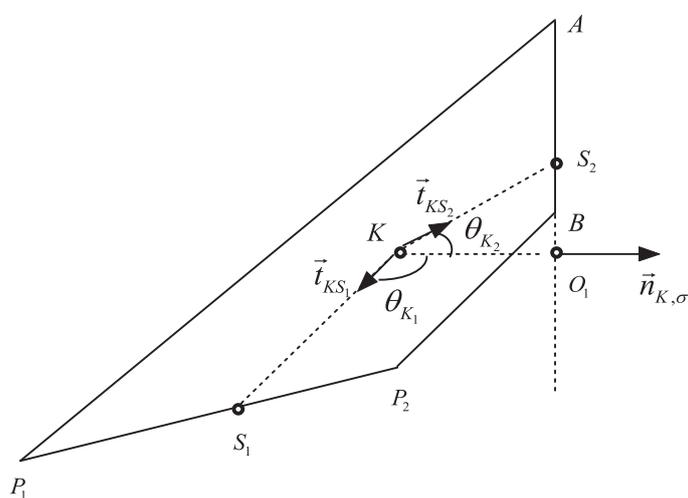


图 9 格式 2 的设计模板 3

令  $\theta_{K_1}$  为  $KS_1$  和  $KO_1$  之间的夹角,  $\theta_{K_2}$  为  $KO_1$  和  $KS_2$  之间的夹角,  $\theta_{L_1}$  为  $LS_3$  和  $LO_2$  之间的夹角,  $\theta_{L_2}$  为  $LO_2$  和  $LS_4$  间的夹角. 记  $\theta_K = \theta_{K_1} + \theta_{K_2}$  和  $\theta_L = \theta_{L_1} + \theta_{L_2}$ , 即  $\theta_K$  为  $KS_1$  和  $KS_2$  之间的夹角,  $\theta_L$  为  $LS_3$  和  $LS_4$  之间的夹角.

由于  $\vec{t}_{KS_1}$  与  $\vec{t}_{KS_2}$  不共线, 因此有

$$\vec{n}_{K\sigma} = \frac{\sin \theta_{K_2}}{\sin \theta_K} \vec{t}_{KS_1} + \frac{\sin \theta_{K_1}}{\sin \theta_K} \vec{t}_{KS_2}. \quad (3.18)$$

类似地,

$$\vec{n}_{L\sigma} = \frac{\sin \theta_{L_2}}{\sin \theta_L} \vec{t}_{LS_3} + \frac{\sin \theta_{L_1}}{\sin \theta_L} \vec{t}_{LS_4}. \quad (3.19)$$

将 (3.18) 代入 (3.4) 得

$$\mathcal{F}_{K,\sigma} = -\kappa(K)|\sigma| \left( \frac{\sin \theta_{K_2}}{\sin \theta_K} \frac{u(S_1) - u(K)}{|KS_1|} + \frac{\sin \theta_{K_1}}{\sin \theta_K} \frac{u(S_2) - u(K)}{|KS_2|} \right) + O(h^2).$$

类似地,

$$\mathcal{F}_{L,\sigma} = -\kappa(L)|\sigma| \left( \frac{\sin \theta_{L_2}}{\sin \theta_L} \frac{u(S_3) - u(L)}{|LS_3|} + \frac{\sin \theta_{L_1}}{\sin \theta_L} \frac{u(S_4) - u(L)}{|LS_4|} \right) + O(h^2).$$

记

$$F_1 = -\kappa(K)|\sigma| \left( \frac{\sin \theta_{K_2}}{\sin \theta_K} \frac{u_{S_1} - u_K}{|KS_1|} + \frac{\sin \theta_{K_1}}{\sin \theta_K} \frac{u_{S_2} - u_K}{|KS_2|} \right), \tag{3.20}$$

$$F_2 = -\kappa(L)|\sigma| \left( \frac{\sin \theta_{L_2}}{\sin \theta_L} \frac{u_{S_3} - u_L}{|LS_3|} + \frac{\sin \theta_{L_1}}{\sin \theta_L} \frac{u_{S_4} - u_L}{|LS_4|} \right). \tag{3.21}$$

将 (3.20) 和 (3.21) 代入 (3.9) 得

$$\begin{aligned} F_{K,\sigma} &= \mu_1 \frac{\kappa(K)|\sigma|}{\sin \theta_K} \left( \frac{\sin \theta_{K_2}}{|KS_1|} + \frac{\sin \theta_{K_1}}{|KS_2|} \right) u_K \\ &\quad - \mu_2 \frac{\kappa(L)|\sigma|}{\sin \theta_L} \left( \frac{\sin \theta_{L_2}}{|LS_3|} + \frac{\sin \theta_{L_1}}{|LS_4|} \right) u_L \\ &\quad - \mu_1 \frac{\kappa(K)|\sigma|}{\sin \theta_K} \left( \frac{\sin \theta_{K_2}}{|KS_1|} u_{S_1} + \frac{\sin \theta_{K_1}}{|KS_2|} u_{S_2} \right) \\ &\quad + \mu_2 \frac{\kappa(L)|\sigma|}{\sin \theta_L} \left( \frac{\sin \theta_{L_2}}{|LS_3|} u_{S_3} + \frac{\sin \theta_{L_1}}{|LS_4|} u_{S_4} \right). \end{aligned} \tag{3.22}$$

然后, 与上一小节 (从 (3.12) 到 (3.15)) 类似, 可得到保正格式 (3.16)–(3.17).

### 4 数值结果

本节将给出关于非定常扩散方程的数值结果, 其中时间离散采用通常的一阶向后隐式 Euler 格式, 空间离散采用上一节构造的保正格式. 我们采用与 [44] 相同的方法求解所得的离散系统, 即采用 Picard 迭代方法求解得到的非线性代数方程组, 采用 BiCGStab 方法求解线性代数方程组. 我们首先考察新格式的精度, 然后考察其保正性. 对解  $u$ , 引入如下离散  $L_2$ -范数:

$$\varepsilon_2^u = \left[ \sum_{K \in \mathcal{J}} (u_K - u(K))^2 m(K) \right]^{1/2},$$

对流  $F$ , 采用如下离散  $L_2$ -范数:

$$\varepsilon_2^F = \left[ \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} (F_{K,\sigma} - \mathcal{F}_{K,\sigma})^2 \right]^{1/2}.$$

计算区域取为  $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ . 随机四边形网格定义如下:  $x_{ij} = \frac{i}{T} + \frac{\sigma}{T}(R_x - 0.5)$ ,  $y_{ij} = \frac{j}{T} + \frac{\sigma}{T}(R_y - 0.5)$ , 其中  $\sigma \in [0, 1]$  是一个控制扭曲程度的参数,  $R_x$  和  $R_y$  是随机变量. 本文我们取  $\sigma = 0.7$ .

#### 4.1 格式的精度

考虑如下的线性非定常扩散问题:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \Delta u = f(x, y, t), \quad \text{在 } \Omega \times (0, T] \text{ 内,}$$

$$u(x, y, 0) = \varphi(x, y), \quad \text{在 } \Omega \text{ 内,}$$

$$u(x, y, t) = g(x, y, t), \quad \text{在 } \partial\Omega \times (0, T] \text{ 上.}$$

精确解取为

$$u(x, y, t) = e^{-2\pi^2 t} \sin(\pi x) \sin(\pi y).$$

我们在随机四边形网格 (图 10) 上测试格式的精度. 取  $\Delta t = 1/N$  和  $T = 0.1$ , 其中  $N$  表示网格数. 表 1 给出了格式 1 的精度, 可以看到, 对于解本身, 格式 1 达到了二阶收敛率; 对于流, 格式 1 的收敛率高于 1.5 阶. 表 2 给出了格式 2 的精度, 对于解本身, 格式 2 获得了近似二阶收敛率; 对于流, 格式 2 达到了高于 1.7 阶的收敛率. 这说明我们的格式具有较高精度.

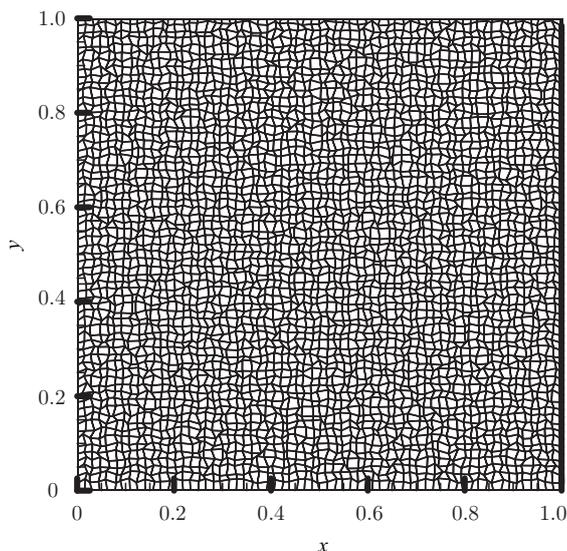


图 10 随机四边形网格 ( $64 \times 64$ )

表 1 格式 1 在随机四边形网格上的收敛性结果

网格数	64	256	1024	4096	16384
$\epsilon_2^u$	2.20E-2	5.31E-3	1.35E-3	3.20E-4	7.96E-5
收敛阶	-	2.05	1.98	2.08	2.01
$\epsilon_2^F$	1.11E-1	2.76E-2	7.22E-3	1.95E-3	6.52E-4
收敛阶	-	2.01	1.93	1.89	1.58

表 2 格式 2 在随机四边形网格上的收敛性结果

网格数	64	256	1024	4096	16384
$\epsilon_2^u$	2.04E-2	5.37E-3	1.38E-3	3.50E-4	8.76E-5
收敛阶	-	1.93	1.95	1.99	2.00
$\epsilon_2^F$	1.35E-1	4.05E-2	9.42E-3	2.87E-3	8.37E-4
收敛阶	-	1.74	2.10	1.72	1.78

### 4.2 格式的保正性

考虑如下的非线性非定常扩散问题:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}((1+u)\nabla u) = 0, & (x, y, t) \in \Omega \times (0, T], \\ u(x, y, 0) = 10 \exp\left(\frac{a^2(x-c)^2 + b^2(y-c)^2}{a^2(x-c)^2 + b^2(y-c)^2 - a^2b^2}\right), & a^2(x-c)^2 + b^2(y-c)^2 < a^2b^2, \\ u(x, y, 0) = 0, & a^2(x-c)^2 + b^2(y-c)^2 \geq a^2b^2, \\ (1+u)\frac{\partial}{\partial \vec{n}}u(x, y, t) = 0, & (x, y) \in \partial\Omega, t \in (0, T], \end{cases}$$

其中  $a = b = 0.01, c = 0.5$ .

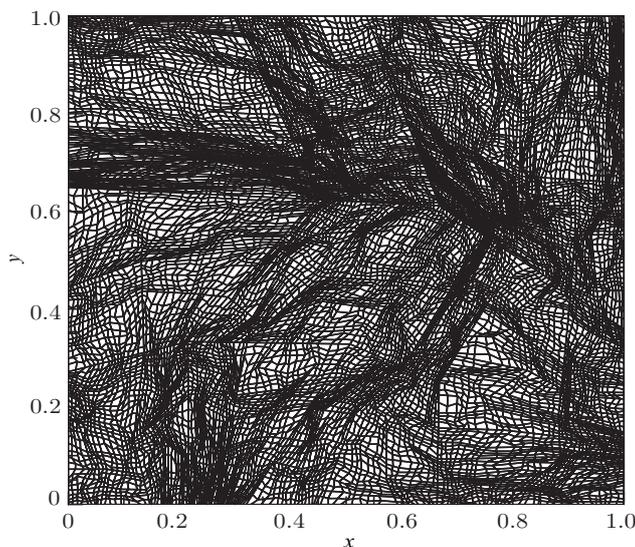


图 11 变形的 Shestakov 网格 (128 × 128)

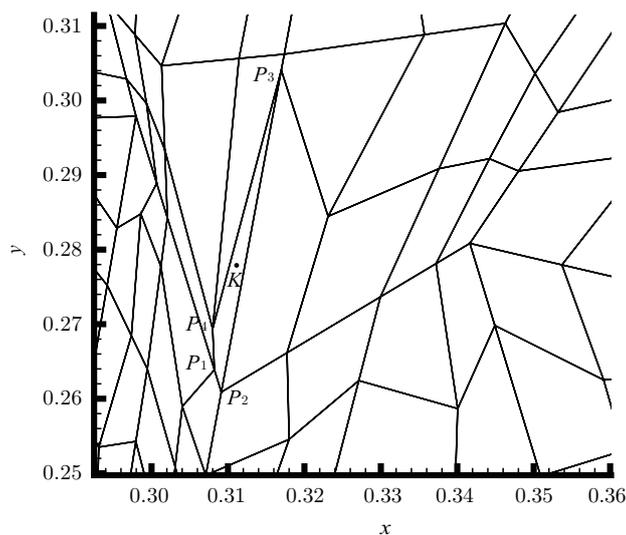


图 12 变形的 Shestakov 网格的局部放大图

该问题没有源汇项, 边界上流为 0, 初值是非负的, 因此它的解是非负的. 我们使用了两种计算网格: 规模为  $128 \times 128$  的变形的 Shestakov 网格 (图 11) 和规模为  $64 \times 64$  的随机四边形网格 (图 10), 取  $\Delta t = 1.0d - 6$ , 计算到  $T = 0.045$ . 图 12 给出了变形的 Shestakov 网格的局部放大图, 可以看出网格出现了图 4 所示的情形, 即网格中心  $K$  往网格边  $P_1P_2$  所作的垂线交于网格边  $P_3P_4$ . 已有的数值结果表明, 九点格式计算出负 (见 [44, 45, 57]). 图 13 和 14 分别给出了格式 1 和 2 在变形的 Shestakov 网格上的计算结果, 图 15 和 16 分别给出了格式 1 和 2 在随机四边形网格上的计算结果, 可以看到数值解都是非负的. 这验证了我们的格式是保正的.

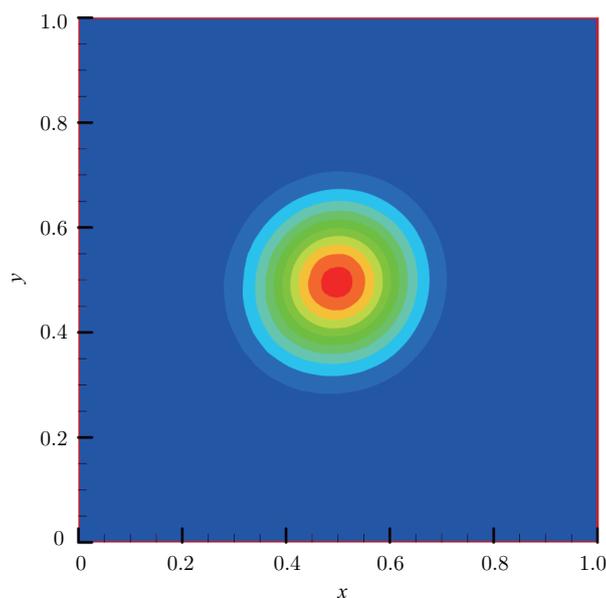


图 13 格式 1 在变形的 Shestakov 网格上的计算结果 ( $u_{\min} = 1.16E-12$ )

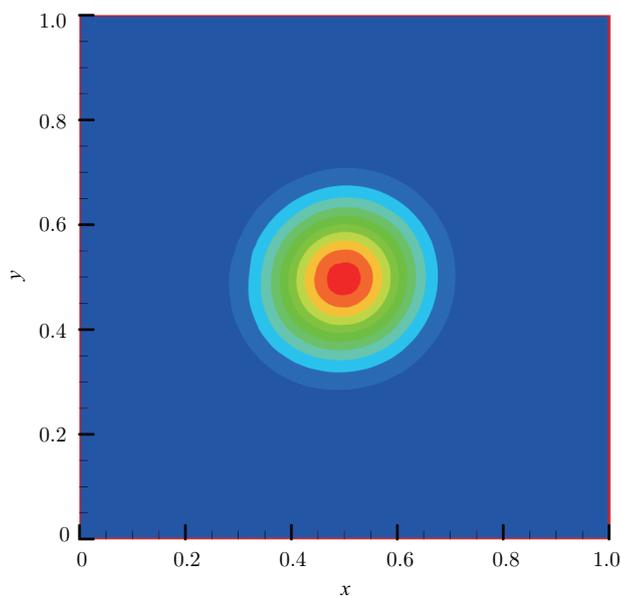
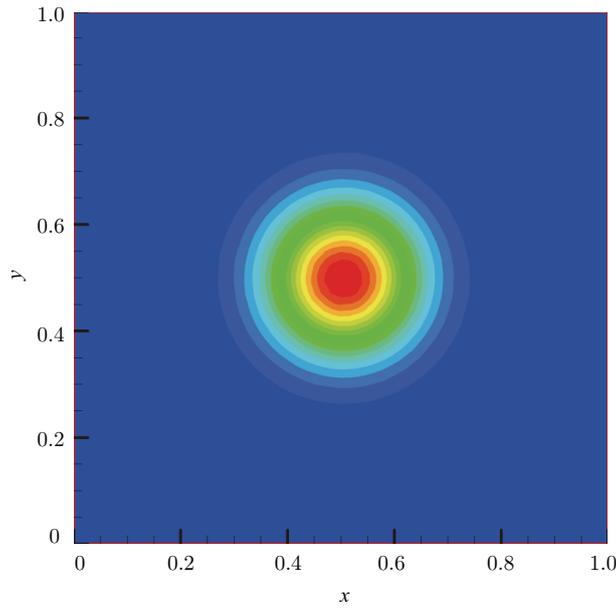
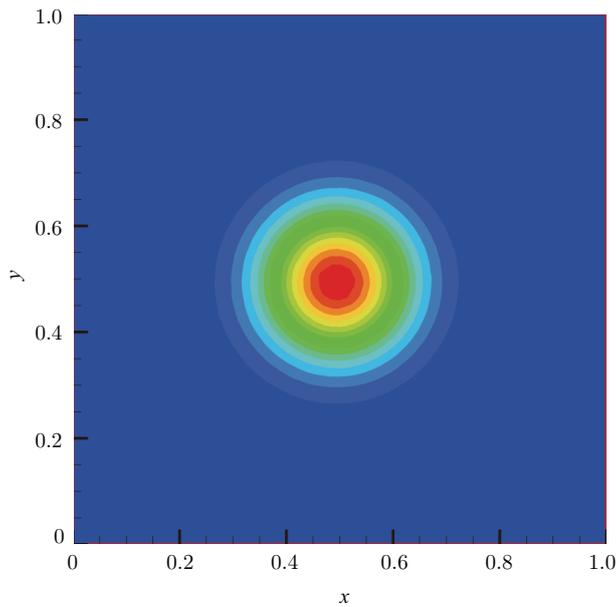


图 14 格式 2 在变形的 Shestakov 网格上的计算结果 ( $u_{\min} = 2.79E-13$ )

图 15 格式 1 在随机四边形网格上的计算结果 ( $u_{\min} = 1.25\text{E}-12$ )图 16 格式 2 在随机四边形网格上的计算结果 ( $u_{\min} = 1.19\text{E}-13$ )

## 5 小结

本文简要介绍了扩散方程离散格式的设计需要满足的一些特性, 并回顾了扩散方程具有保正性的离散格式的研究概况. 本文主要结果是, 构造了大变形网格上扩散方程新的保正的有限体积格式, 并且, 特别针对四边形网格的特点, 给出了一类新的保正格式的设计, 该格式设计也适用于任意 (星形) 多边形网格. 它们与已有的保正格式的主要差别在于: 在网格扭曲严重的情形, 在 [44] 中的保正格式

设计中, 网格边上的离散法向流表达式中可能不出现该网格边上的物理量, 而本文设计的保正格式中, 不仅考虑了网格的几何变形, 而且在每个网格边上的离散法向流的离散模板中包括该网格边, 离散法向流的表达式中一定包含有当前网格边上定义的物理量, 因此该格式直接反映了当前网格边上物理量的变化. 对于在扭曲四边形网格上九点格式计算出负的算例, 在同样扭曲的网格上, 本文给出的数值结果验证了新格式具有保正性, 且具有较高精度. 以后将进一步研究分析新格式的计算效率问题, 并应用于非平衡辐射扩散方程组等问题的求解.

致谢 作者对审稿人提出的改进建议表示衷心的感谢.

## 参考文献

- 1 Lipnikov K, Shashkov M, Svyatskiy D, et al. Monotone finite volume schemes for diffusion equations on unstructured triangular and shape-regular polygonal meshes. *J Comput Phys*, 2007, 227: 492–512
- 2 袁光伟, 杭旭登, 盛志强, 等. 辐射扩散计算方法若干研究进展. *计算物理*, 2009, 26: 475–500
- 3 Pert G J. Physical constraints in numerical calculations of diffusion. *J Comput Phys*, 1981, 42: 20–52
- 4 Morel J E, Dendy J E, Hall M L, et al. A cell centered Lagrangian-mesh diffusion differencing scheme. *J Comput Phys*, 1992, 103: 286–299
- 5 Wu J, Dai Z, Gao Z, et al. Linearity preserving nine-point schemes for diffusion equation on distorted quadrilateral meshes. *J Comput Phys*, 2010, 229: 3382–3401
- 6 Shashkov M. *Conservative Finite Difference Methods on General Grids*. Boca Raton: CRC Press, 1996
- 7 袁光伟, 杭旭登, 盛志强. 拟线性抛物方程组具有界面外推的并行本性差分方法. *中国科学 A 辑*, 2007, 37: 145–164
- 8 Mishev I D. Finite volume methods on Voronoi meshes. *Numer Meth Partial Differential Equations*, 1998, 12: 193–212
- 9 Eymard R, Gallüet T, Herbin R. *Finite Volume Methods*. In: Ciarlet P G, Lions J L, eds. *Handbook of Numerical Analysis*, vol. VII. Amsterdam: North-Holland, 2000
- 10 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*, 1980, 1: 217–224
- 11 Kershaw D S. Differencing of the diffusion equation in Lagrangian hydrodynamic codes. *J Comput Phys*, 1981, 39: 375–395
- 12 Lipnikov K, Manzini G, Svyatskiy D. Analysis of the monotonicity conditions in the mimetic finite difference method for elliptic problems. *J Comput Phys*, 2011, 230: 2620–2642
- 13 Aavatsmark I. Comparison of monotonicity for some multipoint flux approximation methods. In: Eymard R, Hérard J M, eds. *Finite Volumes for Complex Applications*. New York: Wiley 2008, 19–34
- 14 Aavatsmark I. An introduction to multipoint flux approximations for quadrilateral grids. *Comput Geosci*, 2002, 6: 405–432
- 15 Aavatsmark I, Eigestad G, Mallison B, et al. A compact multipoint flux approximation method with improved robustness. *Numer Meth Partial Differential Equations*, 2008, 24: 1329–1360
- 16 Nordbotten J M, Aavatsmark I, Eigestad G T. Monotonicity of control volume methods. *Numer Math*, 2007, 106: 255–288
- 17 Ciarlet P G. Discrete maximum principle for finite-difference operators. *Aequationes Math*, 1970, 4: 338–352
- 18 Draganescu A, Dupont T F, Scott L R. Failure of the discrete maximum principle for an elliptic finite element problem. *Math Comp*, 2004, 74: 1–23
- 19 Karátson J, Korotov S, Křížek M. On discrete maximum principles for nonlinear elliptic problems. *Math Comput Simul*, 2007, 76: 99–108
- 20 Keilegavlen E, Aavatsmark I. Monotonicity for MPFA methods on triangular grids. *Comput Geosci*, 2011, 15: 3–16
- 21 Korotov S, Krizek M, Neittaanmäki P. Weakened acute type condition for tetrahedral triangulations and the discrete maximum principle. *Math Comp*, 2000, 70: 107–119
- 22 Kuzmin D, Shashkov M J, Svyatskiy D. A constrained finite element method satisfying the discrete maximum principle for anisotropic diffusion problems. *J Comput Phys*, 2009, 228: 3448–3463
- 23 Lipnikov K, Manzini G, Svyatskiy D. Monotonicity conditions in the mimetic finite difference method. In: Fort J, Furst J, Halama J, eds. *Springer Proceedings in Mathematics “Finite Volumes for Complex Applications VI Problems & Perspectives”*, vol. 1. New York: Springer, 2011, 653–662
- 24 Nordbotten J M, Aavatsmark I. Monotonicity conditions for control volume methods on uniform parallelogram grids

- in homogeneous media. *Comput Geosci*, 2005, 9: 61–72
- 25 Sharma P, Hammett G W. Preserving monotonicity in anisotropic diffusion. *J Comput Phys*, 2007, 227: 123–142
  - 26 Šolín P, Vejchodský T, Araiza R. Discrete conservation of nonnegativity for elliptic problems solved by the hp-FEM. *Math Comput Simul*, 2007, 76: 205–210
  - 27 Vohralík M, Wohlmuth B. Mixed finite element methods: implementation with one unknown per element, local flux expressions, positivity, polygonal meshes, and relations to other methods. Preprint R10031, Laboratoire Jacques-Louis Lions and HAL Preprint 00497394
  - 28 Ciarlet P G, Raviart P A. Maximum principle and uniform convergence for the finite element method. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 1973, 2: 17–31
  - 29 Ruas Santos V. On the strong maximum principle for some piecewise linear finite element approximate problems of nonpositive type. *J Fac Sci Univ Tokyo Sect IA Math*, 1982, 29: 473–491
  - 30 Brandts Jan H, Korotov S, Krížek M. The discrete maximum principle for linear simplicial finite element approximations of a reaction-diffusion problem. *Linear Algebra Appl*, 2008, 429: 2344–2357
  - 31 Faragó I, Horváth R, Korotov S. Discrete maximum principle for linear parabolic problems solved on hybrid meshes. *Appl Numer Math*, 2005, 53: 249–264
  - 32 Faragó I. Discrete maximum principle for finite element parabolic models in higher dimensions. *Math Comput Simul*, 2010, 80: 1601–1611
  - 33 Karátson J, Korotov S. Discrete maximum principles for finite element solutions of some mixed nonlinear elliptic problems using quadratures. *J Comput Appl Math*, 2006, 192: 75–88
  - 34 Elshebli M A T. Discrete maximum principle for the finite element solution of linear non-stationary diffusion-reaction problems. *Appl Math Model*, 2008, 32: 1530–1541
  - 35 Hannukainen A, Korotov S, Vejchodský T. Discrete maximum principle for FE solutions of the diffusion-reaction problem on prismatic meshes. *J Comput Appl Math*, 2009, 226: 275–287
  - 36 Vejchodský T, Korotov S, Hannukainen A. Discrete maximum principle for parabolic problems solved by prismatic finite elements. *Math Comput Simul*, 2010, 80: 1758–1770
  - 37 Wang J, Zhang R. Maximum principles for  $P_1$ -conforming finite element approximations of quasi-linear second order elliptic equations. *SIAM J Numer Anal*, 2012, 50: 626–642
  - 38 Mincsovcics M E. Discrete and continuous maximum principles for parabolic and elliptic operators. *J Comput Appl Math*, 2010, 235: 470–477
  - 39 Nakshatrala K B, Valocchi A J. Non-negative mixed finite element formulations for a tensorial diffusion equation. *J Comput Phys*, 2009, 228: 6726–6752
  - 40 Droniou J, Le Potier C. Construction and convergence study of schemes preserving the elliptic local maximum principle. *SIAM J Numer Anal*, 2011, 49: 459–490
  - 41 Burman E, Ern A. Discrete maximum principle for Galerkin approximations of the Laplace operator on arbitrary meshes. *C R Acad Sci Paris Ser I*, 2004, 338: 641–646
  - 42 Bertolazzi E, Manzini G. A second-order maximum principle preserving volume method for steady convection-diffusion problems. *SIAM J Numer Anal*, 2005, 43: 2172–2199
  - 43 Le Potier C. Finite volume monotone scheme for highly anisotropic diffusion operators on unstructured triangular meshes *C R Acad Sci Paris Ser I*, 2005, 341: 787–792
  - 44 Yuan G, Sheng Z. Monotone finite volume schemes for diffusion equations on polygonal meshes. *J Comput Phys*, 2008, 227: 6288–6312
  - 45 Sheng Z, Yue J, Yuan G. Monotone finite volume schemes of nonequilibrium radiation diffusion equations on distorted meshes. *SIAM J Sci Comput*, 2009, 31: 2915–2934
  - 46 Lipnikov K, Svyatskiy D, Vassilevski Y. Interpolation-free monotone finite volume method for diffusion equations on polygonal meshes. *J Comput Phys*, 2009, 228: 703–716
  - 47 Lipnikov K, Svyatskiy D, Vassilevski Y. A monotone finite volume method for advection-diffusion equations on unstructured polygonal meshes. *J Comput Phys*, 2010, 229: 4017–4032
  - 48 Wang S, Yuan G, Li Y, et al. A monotone finite volume scheme for advection-diffusion equations on distorted meshes. *Int J Numer Meth Fluids*, 2012, 69: 1283–1298
  - 49 Le Potier C. A nonlinear finite volume scheme satisfying maximum and minimum principles for diffusion operators. *Int J Finite Volumes*, 2009, 6: 1–20
  - 50 Sheng Z, Yuan G. The finite volume scheme preserving extremum principle for diffusion equations on polygonal meshes. *J Comput Phys*, 2011, 230: 2588–2604
  - 51 Nordbotten J M, Eigestad G T. Discretization on quadrilateral grids with improved monotonicity properties. *J Comput*

- Phys, 2005, 203: 744–760
- 52 Hoteit H, Mose R, Philippe B, et al. The maximum principle violations of the mixed-hybrid finite-element method applied to diffusion equations. *Numer Meth Eng*, 2002, 55: 1373–1390
- 53 Mlacnik M J, Durlofsky L J. Unstructured grid optimization for improved monotonicity of discrete solutions of elliptic equations with highly anisotropic coefficients. *J Comput Phys*, 2006, 216: 337–361
- 54 Sharma P, Hammett G W. A fast semi-implicit method for anisotropic diffusion. *J Comput Phys*, 2011, 230: 4899–4909
- 55 Liska R, Shashkov M. Enforcing the discrete maximum principle for linear finite element solutions of second-Order elliptic problems. *Commun Comput Phys*, 2008, 3: 852–877
- 56 Wang S, Yuan G, Li Y, et al. Discrete maximum principle based on repair technique for diamond type scheme of diffusion problems. *Int J Numer Meth Fluids*, DOI: 10.1002/fld.2746
- 57 Yao Y, Yuan G. Enforcing positivity with conservation for nine-point scheme of nonlinear diffusion equations. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2012, 223–224: 161–172
- 58 Nagarajan H, Nakshatrala K B. Enforcing the non-negativity constraint and maximum principles for diffusion with decay on general computational grids. *Int J Numer Meth Fluids*, 2011, 67: 820–847
- 59 Angelini O, Chavant C, Chenier E, et al. A finite volume scheme for diffusion problems on general meshes applying monotony constraints. *SIAM J Numer Anal*, 2010, 47: 4193–4213
- 60 Pal M, Edwards G. Non-linear flux-splitting schemes with imposed discrete maximum principle for elliptic equations with highly anisotropic coefficients. *Int J Numer Meth Fluids*, 2011, 66: 299–323
- 61 Evans J A, Hughes T J R, Sangalli G. Enforcement of Constraints and Maximum Principles in the Variational Multiscale Method. ICES Report 09–11
- 62 Yuan G, Sheng Z. Calculating the vertex unknowns of nine point scheme on quadrilateral meshes for diffusion equation. *Sci China Ser A*, 2008, 51: 1522–1536
- 63 Sheng Z, Yuan G. A nine point scheme for the approximation of diffusion operators on distorted quadrilateral meshes. *SIAM J Sci Comput*, 2008, 30: 1341–1361

## The finite volume scheme preserving the positivity for diffusion equation

YUAN GuangWei, SHENG ZhiQiang & YUE JingYan

**Abstract** It is a challenging problem to construct a finite volume scheme preserving positivity for diffusion equations with multimaterial on the distorted meshes. We review the works related with discrete schemes preserving the positivity for diffusion equations, and construct some new cell-centered finite volume schemes to resolve this challenging problem. Both of the geometric deformation of mesh and the change of physical quantity are taken into account in the new schemes. Numerical results verify that the new scheme can preserve the positivity and obtain high accuracy on some distorted meshes.

**Keywords** diffusion equation, cell-centered finite volume scheme, positivity

**MSC(2010)** 65M06, 65M12, 65M55

**doi:** 10.1360/012011-1041