边中点有限体积格式

刘子旗 & 苗帅

2022 年 9 月 19 日

一般在扭曲网格上的有限体积格式，未知量都定义在单元中心和网格节点上。这里我们构造一族未知量定义在网格边上的有限体积格式。

问题介绍

稳态扩散方程

区域 Ω 是二维多边形区域。我们要在区域上求解稳态扩散问题

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (\kappa \nabla u) = f \quad & x \in \Omega \\ u(x) = u_0 \quad & x \in \partial\Omega \end{aligned}$$

其中 $u(x)$ 是未知函数，$\kappa(x)$ 是 2×2 对称正定的矩阵，表示张量型的扩散系数。

非结构网格

我们希望在任意多边形网格上求解方程。多边形网格由单元，节点和边组成。如图1，边 AB 是单元 K 和单元 L 之间的边，它的中点为 E。我们把单元中心和节点连接起来（虚线），使得每条边都被包围在一个四边形内。虚线所组成的网格叫做对偶网格，每条边对应的四边形叫做边控制体。

网格的数据结构见另一篇 notes。

边中点格式（零）

格式构造

在图中虚线围成的四边形 $AKBL$ 中，对方程两边积分，用散度定理得到

$$-\int_{AKBL} \nabla\cdot(\kappa(x)\,\nabla u(x))\;dx = -\sum_{\sigma=KA,AL,LB,BK}\int_\sigma (\kappa(x)\,\nabla u(x))\cdot n_{E,\sigma}\;dx = \int_K f(x)\;dx$$

其中 $n_{E,\sigma}$ 表示虚线对应的法方向，也就是四边形的外法方向。

我们假设扩散系数在每个单元上近似为常数。$\kappa(x)=\kappa(K)+\mathcal{O}(h)$。在虚线网格边上的流量可以表示为

$$F_{E,\sigma} = -\int_\sigma (\kappa(x)\,\nabla u(x))\cdot n_{E,\sigma}\;dx = |\sigma|\,\nabla u(x)\cdot\kappa(K)^T\,n_{E,\sigma}+\mathcal{O}(h^2)$$

数值实现

在网格边中点 E 处，它对应的四边形控制体也用 E 表示。边中点格式表示为

$$\sum_\sigma \mathcal{F}_{E,\sigma} = |E|\,f(E)$$

因此九点格式最终要求解的是一个 $Edges.len$ 维的线性方程组，右端项就是 $|E|\,f(E)$。

注意：这里的 $f(E)$ 表示的是右端项在四边形控制体内的积分平均。在 $f(x)$ 连续的情况下，用边中点处的函数值代替它没什么问题。如果 $f(x)$ 在网格边界处有间断，这样计算就炸球了。这里我们假设 $f(x)$ 在每个控制体内连续，边控制体上的积分平均通过两个三角形内的积分平均加起来得到。

在程序中，我们要遍历每条单元中心和节点之间的连线来装配总体的系数矩阵。

设单元 K 中，对应的边为 $E_1,E_2,\cdots E_n$。边 σ 是单元中心 K 和节点 A 的连线，它的法向为 n_e，从边控制体 E_1 指向边控制体 E_2。

边 σ 上沿着 n_e 方向的流量为

$$\mathcal{F}_\sigma = -|\sigma|\,n_\sigma^T\kappa(K)\,g_K$$

在单元上，近似解的梯度 g_K 通过求解最小二乘问题得到，最小二乘问题的矩阵形式是

让下面这个方程残量最小

$$\begin{pmatrix} x_{E_1} & y_{E_1} & 1 \\ x_{E_2} & y_{E_2} & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{E_n} & y_{E_n} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_K \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{E_1} \\ u_{E_2} \\ \vdots \\ u_{E_n} \end{pmatrix}$$

设其中系数矩阵为 A_K，可以得到 $g_K = I_{2,3}(A_K^T A_K)^{-1} A_K^T u_K$。其中 $I_{2,3} = [1,0,0;0,1,0]$ 表示提取前两个分量。

边 σ 上沿着 n_e 方向的流量为

$$\mathcal{F}_\sigma = |\sigma|\, n_\sigma^T \kappa(K)\, I_{2,3}(A_K^T A_K)^{-1} A_K^T u_K$$

注意 n_e 上的流量既是单元 E_1 流出的，也是 E_2 流入的，因此边上的流量矩阵中，E_1 和 E_2 对应的行一定互为相反数。

在程序中，$\kappa(K)\, I_{2,3}(A_K^T A_K)^{-1} A_K^T$ 这些东西只和单元 K 有关，可以提前算好存起来。

计算边 σ 上的流量时，相当于把边流量矩阵加到总体矩阵中去

$$\begin{pmatrix} -|\sigma|\, n_\sigma^T \kappa(K)\, I_{2,3}(A_K^T A_K)^{-1} A_K^T \\ |\sigma|\, n_\sigma^T \kappa(K)\, I_{2,3}(A_K^T A_K)^{-1} A_K^T \end{pmatrix}$$

它在总体矩阵中对应第 E_1, E_2 行和第 $E_1, E_2, \cdots E_n$ 列。

只考虑 Dirichlet 边界条件。如果某条边 E_i 在区域边界，它直接通过方程的边界条件得到。就是在矩阵中 E_i 对应的行全部改成 0，只有第 E_i 行，第 E_i 列为 1，右端项中 E_i 对应的位置为边界条件在 E_i 处的值。

实验结果

这个格式不行！只有在三角形网格上才能用。

边中点有限体积格式（一）

格式构造

如图1，边 AB 是单元 K 和单元 L 之间的边，它的中点为 E。连接单元中心和节点，围成的四边形 $AKBL$。我们把这个四边形叫做“边控制体”。

在边控制体上对方程两边积分，用散度定理得到

$$-\int_{AKBL} \nabla \cdot (\kappa(x)\,\nabla u(x))\,dx = -\sum_{\sigma=KA,AL,LB,BK} \int_\sigma (\kappa(x)\,\nabla u(x)) \cdot n_{E,\sigma}\,dx = \int_K f(x)\,dx$$

其中 $n_{E,\sigma}$ 表示虚线对应的法方向，也就是边控制体的外法方向。

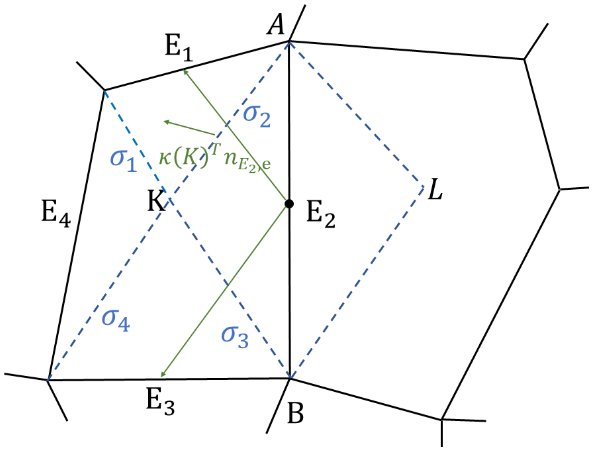


图 1: 数值格式的网格和模板

我们假设扩散系数在每个单元上近似为常数。$\kappa(x) = \kappa(K) + \mathcal{O}(h)$。得到在虚线网格边上的流量近似为

$$F_{E,\sigma} = -\int_\sigma (\kappa(x)\,\nabla u(x)) \cdot n_{E,\sigma}\,dx = -\nabla u \cdot (|\sigma| \kappa(K)^T n_{E,\sigma}) + \mathcal{O}(h^2)$$

向量 $|\sigma|\kappa(K)^T n_{E,\sigma}$ 同样叫做联合法向量。

如图1，在单元 K 中，边 E_0, E_1, E_2, E_3 顺时针排列。在计算 E_2 对应的边控制体上的流量时，我们把联合法向量分解成 $\overrightarrow{E_2E_1}, \overrightarrow{E_2E_3}$ 的组合，即

$$|\sigma|\kappa(K)^T n_{E_2,\sigma_2} = \alpha_1\,\overrightarrow{E_2E_1} + \alpha_2\,\overrightarrow{E_2E_3}$$

根据方向导数的性质

$$\nabla u \cdot \overrightarrow{E_2E_1} = u(E_1) - u(E_2) + \mathcal{O}(h)$$

得到流量表示为

$$F_{E_1,\sigma} = (\alpha_1\,(u(E_1) - u(E_0)) + \alpha_2\,(u(E_1) - u(E_2))) + \mathcal{O}(h^2)$$

同理，在相邻的边控制体上，我们也可以得到另一侧的流量 $F_{E_2,\sigma}$。既然两个流量都是二阶的，考虑到流守恒的要求，我们可以把两个流平均起来，就得到了最终的流量。（此处要注意符号，E_1 和 E_2 上计算的流量都是以向外为正方向）

$$F_\sigma = \frac{1}{2}(F_{E_1,\sigma} - F_{E_2,\sigma})$$

这样就得到了最终的数值格式。

数值实现

在网格边中点 E 处，它对应的边控制体也用 E 表示。边中点格式表示为

$$\sum_{\sigma} \mathcal{F}_{E,\sigma} = |E|\, f(E)$$

注意，这里的 $f(E)$ 表示的是右端项在四边形控制体内的积分平均，而不是在边中点处的函数值。

在程序中，我们要遍历每条单元中心和节点之间的连线来装配总体的系数矩阵。

设单元 U 中，对应的边为 $E_0, E_1, \cdots E_n$，按顺时针排列。节点 P 位于 E_1, E_2 之间。$\sigma = UP$ 是单元中心和节点的连线。它的法向为 n_e，从 E_1 指向 E_2。

在 E_1 对应的边控制体上，σ 上沿着 n_e 方向的流量为

$$F_{E_1,\sigma} = \alpha_{1,0}\,(u(E_1) - u(E_0)) + \alpha_{1,2}\,(u(E_1) - u(E_2))$$

其中系数由向量分解确定

$$|\sigma|\kappa(K)^T n_\sigma = \alpha_{1,0}\,\overrightarrow{E_1E_0} + \alpha_{1,2}\,\overrightarrow{E_1E_2}$$

在 E_2 对应的边控制体上，σ 上沿着 n_e 方向的流量为

$$F_{E_2,\sigma} = \alpha_{2,1}\,(u(E_2) - u(E_1)) + \alpha_{2,3}\,(u(E_2) - u(E_3))$$

其中系数由向量分解确定

$$|\sigma|\kappa(K)^T n_\sigma = \alpha_{2,1}\,\overrightarrow{E_2E_1} + \alpha_{2,3}\,\overrightarrow{E_2E_3}$$

平均之后的流量为

$$F_\sigma = \frac{1}{2}F_{E_1,\sigma} + \frac{1}{2}F_{E_2,\sigma}$$

计算边 σ 上的流量时，相当于把这两个边流量矩阵加到总体矩阵中去

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} -\alpha_{1,0} & \alpha_{1,0} + \alpha_{1,2} & -\alpha_{1,2} \\ \alpha_{1,0} & -\alpha_{1,0} - \alpha_{1,2} & \alpha_{1,2} \end{pmatrix}$$

在总体矩阵中对应第 E_1, E_2 行和第 E_0, E_1, E_2 列，

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} -\alpha_{2,1} & \alpha_{2,1}+\alpha_{2,3} & -\alpha_{2,3} \\ \alpha_{2,1} & -\alpha_{2,1}-\alpha_{2,3} & \alpha_{2,3} \end{pmatrix}$$

在总体矩阵中对应第 E_1, E_2 行和第 E_1, E_2, E_3 列，

只考虑 Dirichlet 边界条件。如果某条边 E_i 在区域边界，它直接通过方程的边界条件得到。就是在矩阵中 E_i 对应的行全部改成 0，只有第 E_i 行，第 E_i 列为 1，右端项中 E_i 对应的位置为边界条件在 E_i 处的值。

边中点格式（二）

格式构造

设单元 U 中，对应的边为 $E_0, E_1, \cdots E_n$，按顺时针排列。节点 P_n 位于 E_{n-1}, E_n 之间。$\sigma_n = UP_n$ 是单元中心和节点的连线。它的法向为 n_σ，从 E_{n-1} 指向 E_n，这个也是流量的正方向。

流量通过边中点的线性变换得到

$$\mathbf{F}_K = A_K\,\delta\mathbf{U}_K, \quad \mathbf{F}_K = (\mathcal{F}_{\sigma_n})^T \quad \delta\mathbf{U}_K = (u_{E_n} - u_{E_{n-1}})^T$$

由于线性精确性，A_K 要满足

$$N_K\,\Lambda_K = A_K\,X_K,$$

其中

$$N_K = (-|\sigma_n|\,\mathbf{n}_{\sigma_n}^T), \qquad X_K = ((\mathbf{x}_{E_n} - \mathbf{x}_{E_{n-1}})^T).$$

可以证明，$X_K^T\,N_K = |K|I_2$，因此 A_K 选取为

$$A_K = \frac{1}{|K|}N_K\,\Lambda(K)\,N_K^T + \gamma_K\,C_K\,C_K^T, \quad \text{with} \quad C_K = I_K - \frac{1}{|K|}N_K\,X_K^T,$$

就可以满足要求。其中 γ_K 是稳定化常数。

数值实现

$f(E)$ 的生成和前面一样。

在程序中，我们要遍历个单元来装配总体的系数矩阵。

流量为 $\mathbf{F}_K = A_K\,\delta\mathbf{U}_K = A_K\,R\,\mathbf{U}_K$，其中

$$R = \begin{bmatrix} -1 & & & & 1 \\ 1 & -1 & & & \\ & 1 & -1 & & \\ & & 1 & -1 & \\ & & & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

边 σ_n 上的流量对应 $A_K\,R$ 的第 n 行，相当于把这两个边流量矩阵加到总体矩阵中去

$$\begin{pmatrix} e_n^T\,A_K\,R \\ -e_n^T\,A_K\,R \end{pmatrix}$$

它在总体矩阵中对应第 E_{n-1}, E_n 行和第 $E_1, E_2, \cdots E_n$ 列。也就相当于把 $R^T A_K R$ 加到第 $E_1, E_2, \cdots E_n$ 行和第 $E_1, E_2, \cdots E_n$ 列上面去。

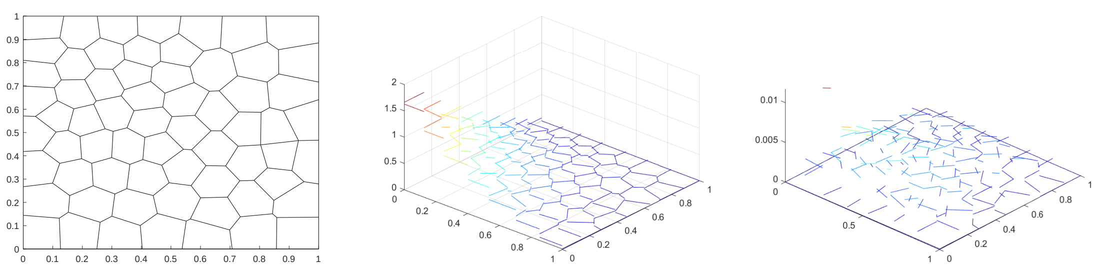
实验结果

实验 1

求解稳态扩散方程，精确解和扩散系数选为

$$u = \sin((x-1)(y-1)) - (x-1)^3(y-1)^2 \qquad a = \begin{bmatrix} 1.5 & 0.5 \\ 0.5 & 1.5 \end{bmatrix}$$

网格为随机多边形网格，使用的网格和结果如图。



(a) 多边形网格　　(b) 数值解 u_h　　(c) 误差 $u - u_h$

图 2: 实验结果 1

在这样的网格上，误差已经达到了 10^{-2}。

九点有限体积格式			边中点有限体积格式		
DOF	$\|u-u_h\|_\infty$	order	DOF	$\|u-u_h\|_\infty$	order
56	4.32e-02	*	92	5.43e-02	*
224	1.08e-02	1.99381	352	1.77e-02	1.67478
896	2.72e-03	1.99582	1376	4.96e-03	1.86234
3584	6.81e-04	1.99781	5440	1.31e-03	1.93628
14336	1.70e-04	1.99893	21632	3.37e-04	1.9693

实验 2

精确解和扩散系数选为

$$u = 16\,x\,y\,(1-x)\,(1-y) \qquad a = \begin{bmatrix} 1.5 & 0.5 \\ 0.5 & 1.5 \end{bmatrix}$$

使用的网格如图。对网格不断加密，得到收敛阶如下表

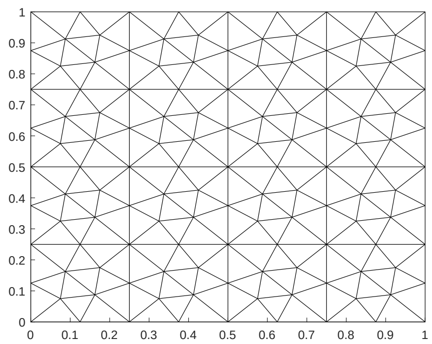


图 3: 实验 2 网格

边中点有限体积格式可以达到二阶收敛，而且在某些特殊的网格上，它比九点格式更有优势。

用 PPR 技术重构边上的流量

界面上的 PPR 技术

对于某条原始网格边 E_0，它是单元 K 和单元 L 的公共边。单元 K 和 L 的边用 $\mathcal{E}(K)$ 和 $\mathcal{E}(L)$ 表示。

对于扩散系数连续的情况，我们用二次多项式对所有边中点做最小二乘拟合，相当于求解优化问题

$$\min_{p\in P_2}\sum_{E\in\mathcal{E}(K)\cup\mathcal{E}(L)}|p(\boldsymbol{x}_E)-u_E|^2$$

得到多项式 $p(x)$，此时它的梯度 $\nabla p(E_0)$ 就是 E_0 处关于梯度的重构，它是二阶的。然后，我们可以计算出 E_0 处的流量为 $\Lambda\nabla p(E_0)$。

对于扩散系数间断的情况，我们在两个单元上分别拟合两个二次多项式，同时利用流连续条件把两个多项式拼起来。这相当于求解约束优化问题

$$\begin{aligned}\min_{p_K,p_L\in P_2}&\sum_{E\in\mathcal{E}(K)}|p_K(\boldsymbol{x}_E)-u_E|^2+\sum_{E\in\mathcal{E}(L)}|p_L(\boldsymbol{x}_E)-u_E|^2\\ \text{s.t.}\quad & p_K(\boldsymbol{x})=p_L(\boldsymbol{x})\quad \boldsymbol{x}\in E\\ & \Lambda_K\nabla p_K(\boldsymbol{x})=\Lambda_L\nabla p_L(\boldsymbol{x})\quad \boldsymbol{x}\in E\end{aligned}$$

其中 $\Lambda_K\nabla p_K(\boldsymbol{x})=\Lambda_L\nabla p_L(\boldsymbol{x})$ 就是边界上的流量。它应该也是二阶精度的。

注意：这样做会破坏守恒性，重构出来的流量不满足在原始网格上守恒。

数值细节

间断系数的情况，多项式表示为

$$p_K(x,y)=a_{K,0}+a_{K,1}\,x+a_{K,2}\,y+a_{K,3}\,x^2+a_{K,4}\,x\,y+a_{K,5}\,y^2$$

它的梯度

$$\nabla p_K(x,y)=\begin{pmatrix}a_{K,1}+2\,a_{K,3}\,x+a_{K,4}\,y\\ a_{K,2}+2\,a_{K,5}\,y+a_{K,4}\,x\end{pmatrix}$$

设 E 的两个端点是对于界面上的点，可以表示为 $x=x_E+$