

一类抛物型方程有限元算法的计算准则*

欧阳华江 肖 丁

(大连理工大学, 1988年10月28日收到)

摘 要

用有限元法分析瞬态温度场, 很有可能得到“振荡”和“超界”的计算结果, 这两种现象不符合热传导规律。为解决此问题, 我们提出时间单调性和空间单调性的概念, 推导出三维无源热传导方程的数值解的时间单调性的几组充分条件。对某些特殊边值问题, 使用规则单元网格, 可以得到合理结果时 $\Delta t/\Delta x^2$ 的上下界公式。文中还研究了空间单调性。最后我们还讨论了集中质量阵的算法。

针对以热传导方程为代表的这一类抛物型方程的有限元算法, 我们创造性地给出几组计算准则。

一、问题的提出

近年来, 有限元法被用于分析瞬态温度场。因为用有限元易于剖分空间域, 这个方法优越于以前常用的有限差分法。但是用有限元法, 很可能会得到“振荡”和/或“超界”的计算结果。以一个一维无源热传导问题为例: 左端是绝热边界, 右端是对流换热边界, 导热系数 $\alpha=67$, 右端对流换热系数 $\beta=0.05$, 初始温度分布 $T_0=100$, 环境温度 $T_3=70$, 杆长 $L=1000$, 若取时间步长 $\Delta t=1.5$ 和线性单元尺寸 $\Delta x=20$, 并用 Crank-Nicolson 格式, 所得结果超出了合理范围——最高温度 T_0 , 前几步的计算结果见图1。若取 $\Delta t=4$ 和 $\Delta x=20$, 右端点的温度先下降, 然后略有回升, 最后收敛(下降)于 T_3 , 如图2所示。

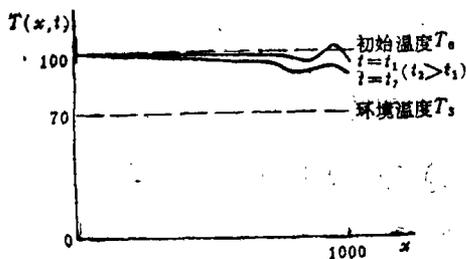


图1 温度场的空间分布 (“超界”)

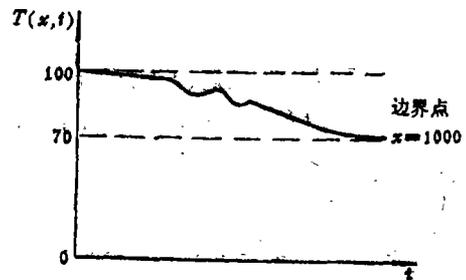


图2 温度场的时域变化 (“振荡”)

为了避免上述不合理的现象, 已经开展了大量的研究工作^[1~5, 7, 8], 但这个问题远未得到

* 郭瑞锋推荐。

很好地解决。前人的工作都是从控制方程的谱半径出发来研究这个问题^[5]，我们知道，最大广义特征值无法准确地估算出来，没有直接和简单的估算公式，所以按这种研究策略已有很长一段时间没能取得重大进展。在本文中，我们提出两个新概念，在与以前工作不同的途径推出一些全新的结论，在此领域中取得了一点突破。

二、有限元列式和单调性

我们研究如下抛物型热传导方程

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} &= \alpha \nabla^2 T(x, t) + f(x, t), \quad T(x, 0) = T_0, \quad x \in V \\ T &= T_1, \quad x \in S_1, \quad \frac{\partial T}{\partial n} = 0, \quad x \in S_2, \quad \frac{\partial T}{\partial n} = \beta(T_3 - T), \quad x \in S_3 \end{aligned} \right\} \quad (2.1)$$

这里 $T = T(x, t)$ 是温度场函数， x 是坐标向量， f 是源项， α, β 分别是导温系数和表面对流换热系数， S_1, S_2, S_3 分别是所研究区域 V 的第一类、第二类、第三类边界曲面。把空间域 V 离散为若干个具有 m 个节点的单元 V_i ，单元形函数阵为 $[N(x)] = [N_1(x), N_2(x), \dots, N_m(x)]$ ，单元节点温度向量 $\{q(t)\}^T = \{q_1(t), q_2(t), \dots, q_m(t)\}$ ，则 $T(x, t) = \sum [N(x)] \cdot \{q(t)\}$ ， $\partial T / \partial t = \sum [N(x)] \{\dot{q}(t)\}$ ，按 Galerkin 法可推出^[10]

$$\left. \begin{aligned} [M]\{\dot{q}\} + [K]\{q\} &= \{F\}, \quad [M] = \sum_i \iiint_{V_i} [N]^T [N] dV \\ [K] &= [K_v] + [K_s], \quad [K_v] = \sum_i \alpha \iiint_{V_i} [\nabla N]^T [\nabla N] dV \\ [K_s] &= \sum_j \alpha \beta \iint_{S_j} [N]^T [N] dS, \quad \{F\} = \sum_i \iiint_{V_i} f [N]^T dV + \sum_j \iint_{S_j} \alpha \beta T_3 [N]^T dS \end{aligned} \right\} \quad (2.2)$$

这里 S_j 表示具有第三类边界条件的第 j 个单元的外边界。

在(2.2)中，温度刚度阵 $[K]$ 由两部分组成： $[K_v]$ 是各个单元的刚度贡献，而 $[K_s]$ 是边界的刚度贡献。如果存在第一类边界，应对 $[K]$ 和 $\{F\}$ 做如下处理：把 K_{kk} 换成 BK_{kk} ， F_k 换成 $BK_{kk}T_1$ ，这里 B 是大数，可取 $B=10^8$ ， k 是第一类边界面上的节点。

用一组差分格式把(2.2)在时域上离散为

$$[M](\{q\}^{n+1} - \{q\}^n) / \Delta t + [K](\theta \{q\}^{n+1} + \gamma \{q\}^n) = \theta \{F\}^{n+1} + \gamma \{F\}^n \quad (2.3)$$

其中上标表示各离散时间步， $0 \leq \theta \leq 1$ ， $\gamma = 1 - \theta$ 。(2.3)还可改写为

$$([M] / \Delta t + \theta [K]) \{q\}^{n+1} = ([M] / \Delta t - \gamma [K]) \{q\}^n + \theta \{F\}^{n+1} + \gamma \{F\}^n \quad (2.4)$$

因为算法(2.4)当 $\theta \geq 0.5$ 时是绝对稳定的^[6]，我们只研究 $\theta \geq 0.5$ 的无源问题。

如前所述，有限元解很可能表现出“振荡”和/或“超界”。经过仔细研究发现，这两种现象都破坏了无源热传导问题的温度场所应具有的时间单调性和空间单调性^[9,10]。图2的结果破坏了时间单调性，称作“振荡”，而图1的结果破坏了空间单调性，称作“超界”。无源热传导问题的温度场总应具有时间单调性，在某些情况下还应具有空间单调性，所以合理的数值解应具有某种单调性^[10]。这一新观点使我们获得全新的和有用的结论。

三、时间单调性

时间单调性的定义：若 T_1 和 $T_3 \geq T_0$ ，则对任意时刻 t_n ， $\{q\}^{n+1} \geq \{q\}^n$ ；或若 T_1 和 $T_3 \leq T_0$ ，则对任意时刻 t_n ， $\{q\}^{n+1} \leq \{q\}^n$ 。

对无源热传导问题，可推出

$$\left. \begin{aligned} ([M]/\Delta t + \theta[K])\{q\}^{n+1} &= ([M]/\Delta t - \gamma[K])\{q\}^n + \{F\} \\ \{F\} &= \sum_j \alpha\beta T_3 \iint_{S_j} [N]^T dS \end{aligned} \right\} \quad (3.1)$$

可从(3.1)中推出

$$([M]/\Delta t + \theta[K])(\{q\}^{n+1} - \{q\}^n) = ([M]/\Delta t - \gamma[K])(\{q\}^n - \{q\}^{n-1}) \quad (3.2)$$

$$([M]/\Delta t + \theta[K])(\{q\}^1 - \{q\}^0) = \{F\} - [K]\{q\}^0 \quad (3.3)$$

假定初值 T_0 是常数，则 $\{q\}^0 = T_0\{I\}$ ， $\{I\} = \{1, 1, \dots, 1\}^T$ 。下面我们仔细研究(3.3)的右端项。

1. 没有第一类边界。考察 $[K] = [K_s] + [K_v]$ ，已知 $[K_v]$ 是个半正定的奇异阵，其任意一行元素之和及任意一列元素之和分别为零，即 $[K_v]\{q\}^0 = T_0[K_v]\{I\} = 0$ ，由此推得

$$\{F\} - [K]\{q\}^0 = \{F\} - [K_s]\{q\}^0 = \{F\} - T_0[K_s]\{I\}$$

$$= \sum_j \alpha\beta \iint_{S_j} [N]^T (T_3 - T_0[N]\{I\}) dS = (T_3 - T_0) \sum_j \iint_{S_j} \alpha\beta [N]^T dS \quad (3.4)$$

在瞬态分析中，为提高求解效率多使用低阶单元。对平面三角元、平面四节点等参元、四面体元、空间八节点等参元和一维线性元等低阶单元，在单元边界上 $0 \leq [N(x)]^T \leq \{I\}$ ，考察(3.2)可见，当满足(3.5)时，若 $T_3 \geq T_0$ ，则 $\{q\}^1 \geq \{q\}^0$ ；或若 $T_3 \leq T_0$ ，则 $\{q\}^1 \leq \{q\}^0$ 。

$$([M]/\Delta t + \theta[K])^{-1} \geq 0 \quad (3.5)$$

再考察(3.2)发现，按照数学归纳法，当满足(3.6)，若 $T_3 \geq T_0$ ，则 $\{q\}^{n+1} \geq \{q\}^n$ ；或若 $T_3 \leq T_0$ ，则 $\{q\}^{n+1} \leq \{q\}^n$ 。

$$([M]/\Delta t + \theta[K])^{-1}([M]/\Delta t - \gamma[K]) \geq 0; \quad ([M]/\Delta t + \theta[K])^{-1} \geq 0 \quad (3.6)$$

2. 存在第一类边界。设节点 k 在第一类边界面上， $\{F\} - [K]\{q\}^0$ 中对应的元素为

$$(\{F\} - [K]\{q\}^0)_k = F_k - \left(\sum_{i=1}^l K_{ki} - K_{kk} + BK_{kk} \right) = (BT_1 - (B-1)T_0)K_{kk} \quad (3.7)$$

在(3.7)的推导中利用了 $\sum_{i=1}^l K_{ki} = 0$ ，这里 l 是节点总数。引入大数 B 是为使在任意时刻 t_n ，

$q_k^n = T_1$ ，理论上讲， B 非常之大，以致于可认为 B 与 $B-1$ 相等，在计算机上，大数 B 会把 $B-1$ 中的1“吃掉”，所以可得

$$(\{F\} - [K]\{q\}^0)_k = BK_{kk}(T_1 - T_0) \quad (3.8)$$

把(3.8)与(3.4)做比较，可见：同样满足(3.5)，若 $T_1 \geq T_0$ ，则 $\{q\}^1 \geq \{q\}^0$ ，或若 $T_1 \leq T_0$ ，则 $\{q\}^1 \leq \{q\}^0$ 。同理，按照数学归纳法，也可推出(3.6)。

总而言之，(3.6)是具有时域上单调解的一组充分条件（计算准则）。

还有获得合理数值解的其它准则，其中一组为

$$([M]/\Delta t + \theta[K])^{-1} \geq 0, ([M]/\Delta t - \gamma[K]) \geq 0 \quad (3.9)$$

在(3.6)和(3.9)中, 都要求逆阵, 这会产生很大的计算量。根据矩阵分析理论^[6], 如果一个正定对称阵的非对角线元素都非正, 那么其逆阵必是非负的。记 $[A] = [M]/\Delta t + \theta[K]$, 因为 $[K]$ 和 $[M]$ 都是正定阵, 则 $[A]$ 也是正定阵, 那么若 $A_{ij} \leq 0$ ($i \neq j$), 必有 $[A]^{-1} \geq 0$, 这样可推出另一组计算准则

$$A_{ij} = M_{ij}/\Delta t + \theta K_{ij} \leq 0 \quad (i \neq j); [M]/\Delta t - \gamma[K] \geq 0 \quad (3.10)$$

进一步考虑对线性元, 令其内角不大于 $\pi/2$, 易于证明 $K_{ij} \leq 0$ ^[2], $M_{ij} \geq 0$, (3.10)退化为

$$M_{ij}/\Delta t + \theta K_{ij} \leq 0 \quad (i \neq j); M_{ii}/\Delta t - \gamma K_{ii} \geq 0 \quad (3.11)$$

(3.11)可进一步写作

$$-\min_{\substack{i,j \\ i \neq j}} (M_{ij}/\theta K_{ij}) \leq \Delta t \leq \min_i (M_{ii}/\gamma K_{ii}) \quad (3.12)$$

可以认为, (3.6)和(3.9)是一般的充分条件, 而(3.10)和(3.11)或(3.12)是更方便也是更严格的充分条件。

四、空间单调性

空间单调性的定义: 对任意时刻 t_n 和任意节点 i , 若 $q_i^n \geq q_0^n$, 则 $q_{i+1}^n \geq q_i^n$; 或若 $q_i^n \leq q_0^n$, 则 $q_{i+1}^n \leq q_i^n$ 。

由于极难推导出两个相邻节点的温度差 $q_{i+1}^n - q_i^n$ 的显式公式, 就不能象对时间单调性那样, 也对空间单调性推出一般的结论。但是对某些特殊的、具备空间单调性的情况, 我们可能幸运地获得一些有用的结论。

我们来考虑第一节中的例子, 对于宽度为 Δx 的线性元, 可推出

$$[M] = \frac{\Delta x}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 & & & & \\ 1 & 4 & 1 & & & 0 \\ & 1 & 4 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & 4 & 1 \\ 0 & & & & 1 & 2 \end{bmatrix}, [K] = \frac{\alpha}{\Delta x} \begin{bmatrix} 1 & -1 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & 0 \\ & -1 & 2 & -1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ 0 & & & & -1 & 1 + \beta \Delta x \end{bmatrix} \quad (4.1)$$

$$\{F\} = \{0, 0, \dots, \alpha \beta T_3\}^T$$

注意到 $[K]\{q\}^n = \{q_0^n - q_1^n, q_1^n - q_2^n - (q_0^n - q_1^n), q_2^n - q_3^n - (q_1^n - q_2^n), \dots, q_{i-1}^n - q_i^n - (q_{i-2}^n - q_{i-1}^n), (1 + \beta \Delta x)q_i^n - q_{i-1}^n\}^T \cdot \alpha/\Delta x$, 我们很幸运地发现, 对任意时刻 t_n , $[K]\{q\}^n \geq 0$ 意味着 $T(x, t)$ 是一条从左到右单调减的曲线; 而 $[K]\{q\}^n \leq 0$ 则刚好相反, 这是由于 $[K]$ 中的元素除最后一列外, 都是1或-1或2。可以从(2.4)推出

$$[K]\{q\}^n = \{F\} - ([M]/\Delta t - \gamma[K])(\{q\}^n - \{q\}^{n-1}) \quad (4.2)$$

注意到 $\{F\}$ 的所有元素除最后一个外都是零, 我们发现, 当满足(3.6)或(3.9)或(3.10)或(3.11), 那么对任意时刻 t_n , 若 T_1 和 $T_3 \geq T_0$, $\{q\}^n \geq \{q\}^{n-1}$; 或若 T_1 和 $T_3 \leq T_0$, $\{q\}^n \leq$

$\{q\}^{n-1}$ ，由(4.2)可见，解答具有空间单调性（注意：证明中未用到 $\{F\}$ 和 $[K]$ 的最后一个元素）。

从上述特例可见，时间单调性将导出空间单调性，但反命题并不成立，见第六节中的例题。

五、集中质量阵算法

很多研究者^[5,7,8]用集中质量阵代替协调质量阵，试图改进计算结果。很多计算结果表明，适当集中质量阵 $[M]$ 会改善计算精度，但一些研究者以为这种方法会避免“振荡”，这种观点是错误的。集中质量后， $M_{ij}=0$ ， M_{ii} 有所增加，从(3.12)可推出

$$0 \leq \Delta t \leq \min_i (M_{ii} / \gamma K_{ii}) \tag{5.1}$$

由(5.1)可见，集中质量后，对 Δt 没有下界要求，但仍有上界，尽管上界提高了。我们的计算进一步证实了这一结论。

若使用（隐式）后差格式，即取 $\theta=1$ ，对 Δt 没有上界要求——上界趋于无穷大，所以保险的策略是使用集中质量阵的后差格式。

六、算例和结论

考虑第一节中的算例，如果右端是换热的，由(3.12)和(4.1)推出

$$1/6\theta \leq \alpha \Delta t / \Delta x^2 \leq 1/3(1-\theta)(1+\beta \Delta x) \tag{6.1}$$

如果右端是定温边界，可推出

$$1/6\theta \leq \alpha \Delta t / \Delta x^2 \leq 1/3(1-\theta) \tag{6.2}$$

若集中质量，上面两个公式分别化为

$$0 \leq \alpha \Delta t / \Delta x^2 \leq 1/2(1-\theta)(1+\beta \Delta x); \quad 0 \leq \alpha \Delta t / \Delta x^2 \leq 1/2(1-\theta) \tag{6.3}$$

取 $\alpha=67, \beta=0.03, \Delta x=20, T_0=100, T_3=70, L=1000$ ，由(6.1)得 $1.99 \leq \Delta t \leq 2.49$ 。计算表明满足这个不等式将得到具有时间和空间单调性的解， $\Delta t=2$ 的计算结果列于表1，受本文篇幅限制，表1中只给出前三步的结果。

表1 温度场分布 ($\Delta t=2$)

坐标x \ 时间t	600	640	680	720	760	800	840	880	920	960	1000
2	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	90.0
4	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	88.9
6	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	98.9	86.9

若取 $\Delta t=1.5 < 1.99$ （下界），解答不具备单调性，见表2。

若取 $\Delta t > 2.49$ （上界）直到2.9，解答仍具有两种单调性，因为(3.6)和(3.9)~(3.12)都是充分条件。但若取 Δt 大小2.9，比如 $\Delta t=4$ ，解答只有空间单调性，见表3。

我们所做的大量计算表明， Δt 大于上界仍可得到单调解，但小于下界却不行，上述第一条结论在本文第一作者的博士论文中已给出证明。若 Δt 取得更大，比如 $\Delta t=15$ ，则解答与 $\Delta t=1.5$ 时相似，不具备单调性。

表2

温度场分布

 $(\Delta t=1.5)$

坐标x 时间t	600	640	680	720	760	800	840	880	920	960	1000
1.5	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	91.5
3.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.2	89.8
4.5	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	99.6	88.1

表3

温度场分布

 $(\Delta t=4)$

坐标x 时间t	600	640	680	720	760	800	840	880	920	960	1000
4	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	99.8	85.8
8	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	99.9	98.4	87.0
12	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	99.7	96.0	83.4

表3也表明,空间单调性不同于时间单调性,它还说明,[2,3]中的结论不足以保证获得无“振荡”的解答。

因为热传导、传质或扩散等过程的控制微分方程在形式上完全相同,都是抛物型偏微分方程,我们实际上获得了这一类抛物型方程的有限元算法的计算准则。本文在抛物型方程的数值分析领域里取得了一点突破;对于研究铸造、化学反应等包括扩散现象的数值模拟的工程师很有用。

若希望了解推导和证明的细节,请参阅[10]。

衷心感谢潘敬哲博士提供资助。与王意博士和邓康博士的讨论使我们获益不小,还要感谢邬瑞锋教授、陈万吉研究员和孙焕纯教授的热情指教。

参 考 文 献

- [1] 孔祥谦,《有限单元法在传热学中的应用》,第二版,科学出版社,北京(1986),169—180.
- [2] 515科研组,瞬变温度场问题的有限元解法和最大模原理,计算数学,4,2(1982),113—120.
- [3] 黄玉霞,带第三类边界条件的热传导方程的守恒型格式和最大模原理,计算数学,5,2(1983),220—224.
- [4] Rank, E., C. Katz and H. Werner, On the importance of the discrete maximum principle in transient analysis using finite element methods, *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, 19, 12 (1983), 1771—1782.
- [5] Zienkiewicz, O. C. 著,尹泽勇、江伯南译,唐立民、刘迎曦校,《有限元法》,科学出版社,北京(1986),600—637.
- [6] Householder, A. S. 著,孙家旭等,《数值分析中的矩阵论》,科学出版社,北京(1986),9—32.
- [7] 张柔雷、余颖禾,有限元法求解暂态温度场中阶跃现象的分析,南京工学院学报,3(1983),102—107.
- [8] 纪峰,关于瞬态温度场有限元分析中采用协调或集中质量热容阵的探讨,计算结构力学及其应用,3,2(1986),35—41.
- [9] 欧阳华江、肖丁,一维热传导方程有限元解的单调性准则,计算结构力学及其应用.(待发表)
- [10] 欧阳华江,混凝土长期变形的基本理论及其应用,大连理工大学博士论文(1989,1),29—56.

Criteria of Finite Element Algorithm for a Class of Parabolic Equation

Ouyang Hua-jiang . Xiao Ding

(*Dalian University of Technology, Dalian*)

Abstract

In finite element analysis of transient temperature field, it is quite notorious that the numerical solution may quite likely oscillate and/or exceed the reasonable scope, which violates the natural law of heat conduction. For this reason, we put forward the concept of time monotony and spatial monotony, and then derive several sufficient conditions for monotonic solutions in time dimension for 3-D passive heat conduction equations with a group of finite difference schemes. For some special boundary conditions and regular element meshes, the lower and upper bounds for $\Delta t/\Delta x^2$ can be obtained from those conditions so that reasonable numerical solutions are guaranteed. Spatial monotony is also discussed. Finally, the lumped mass method is analyzed.

We creatively give several new criteria for the finite element solutions of a class of parabolic equation represented by heat conduction equation.