

用稳定双共轭梯度方法数值求解球坐标系下的 Poisson 方程

魏安华¹, 吴茜茜², 朱祚金³

(1. 中国科学技术大学计算机科学与技术学院, 安徽合肥 230027; 2. 合肥工业大学数学学院, 安徽合肥 230009;
3. 中国科学技术大学工程科学学院, 安徽合肥 230027)

摘要: 数值求解球坐标系下的 Poisson 方程, 是计算流体力学的一个关键问题, 为此提出用稳定双共轭梯度方法, 求解了右端源项为-1、边界值为0的典型 Poisson 方程, 给出了类似于圆射流计算区域 $\Omega: \{r \in [7, 52], \theta \in [-\theta_b, \theta_b], \varphi \in [0, 2\pi], \theta_b = \arctan(1/14)\}$ 内的数值解, 并对数值解及其离散方程的残差进行了讨论。

关键词: Bi-CGSTAB(稳定双共轭梯度方法); Poisson 方程; 离散方程残差

中图分类号: O241.8 **文献标识码:** A **doi:** 10.3969/j.issn.0253-2778.2017.08.009

AMS subject classification: 65C

引用格式: 魏安华, 吴茜茜, 朱祚金. 用稳定双共轭梯度方法数值求解球坐标系下的 Poisson 方程[J]. 中国科学技术大学学报, 2017, 47(8): 695-698.

WEI Anhua, WU Qianqian, ZHU Zuojin. Numerical solution to the Poisson equation under the spherical coordinate system with Bi-CGSTAB method [J]. Journal of University of Science and Technology of China, 2017, 47(8): 695-698.

Numerical solution to the Poisson equation under the spherical coordinate system with Bi-CGSTAB method

WEI Anhua¹, WU Qianqian², ZHU Zuojin^{3*}

(1. School of Computer Science and Technology, University of Science and Technology of China, Hefei 230027, China;
2. School of Mathematics, Hefei University of Technology, Hefei 230009, China;
3. School of Engineering Science, University of Science and Technology of China, Hefei 230027, China)

Abstract: Solving the Poisson equations in spherical coordinate system is a key problem in computational fluid dynamics. Hence, using a conjugate gradient method named Bi-CGSTAB, the typical Poisson equation whose right-hand-side source term is -1 with zero boundary value was solved to give a numerical solution in a domain similar to that in round jet calculation $\Omega: \{r \in [7, 52], \theta \in [-\theta_b, \theta_b], \varphi \in [0, 2\pi], \theta_b = \arctan(1/14)\}$. The numerical solution and its relevant residual of discretized equation were discussed.

Key words: Bi-CGSTAB; Poisson equation; residual of discretized equation

收稿日期: 2015-11-11; 修回日期: 2016-03-24

基金项目: 国家自然科学基金(11372303)资助。

作者简介: 魏安华, 男, 1955年生, 硕士/讲师, 研究方向: 计算机应用. E-mail: weianhua@ustc.edu.cn

通讯作者: 朱祚金, 博士/副教授. E-mail: zuojin@ustc.edu.cn

0 引言

不可压缩流体流动问题的数值模拟,求解压力 Poisson 方程^[1]所需的计算量相当多.研究表明:用于加快压力计算过程的近似因子分解方法^[2],可用于直角坐标系下压力 Poisson 方程的求解,适合数值模拟方柱绕流,无论流动是层流^[3]还是湍流^[4].由于该算法在极点($\theta=0$)处沿经线的所有节点都重合在一起,这种情况妨碍了算法的应用.而试图通过求解球坐标系下不可压流体动力学方程,数值模拟湍流射流,关键是计算压力.由此可见,探讨球坐标系下的 Poisson 方程的数值求解,有学术意义.

1 BiCGSTAB 方法求解 Poisson 方程

共轭梯度方法是一种求解线性代数方程组的有效方法^[5].Van der Vorst 提出的稳定双共轭梯度方法(Bi-CGSTAB)^[6],曾用来提高直角坐标系下压力的计算精度^[3-4].现在,在一个拟定的圆形射流计算区域 $\Omega: \{R \in [7, 52], \theta \in [-\theta_b, \theta_b], \varphi \in [0, 2\pi]\}$, $\theta_b = \arctan(1/14)$,我们用 Bi-CGSTAB 方法求解典型的 Poisson 方程

$$\nabla^2 \phi = -1 \quad (1)$$

这里,

$$\nabla^2 = P_1 + P_2 + P_3 \quad (2)$$

$$\left. \begin{aligned} P_1 &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \\ P_2 &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cot \theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \\ P_3 &= \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

假设在区域边界 $\partial\Omega$ 上, $\phi=0$. 为数值计算这个典型的 Poisson 边值问题,我们先用有限差分方法进行离散.考虑到偏微算子 P_2, P_3 有奇点 $\theta=0$, 我们定义函数 $Z(t)$ 如下:

$$Z(t) = \begin{cases} 0, & t=0, \\ 1, & t \neq 0 \end{cases} \quad (4)$$

采用定义中心差分,前差、后差符号 $\delta, \delta^-, \delta^+$, 相应的形式如下:

$$\left. \begin{aligned} \delta \phi_i &= (\phi_{i+1} - \phi_{i-1})/2 \\ \delta^- \phi_i &= \phi_i - \phi_{i-1} \\ \delta^+ \phi_i &= \phi_{i+1} - \phi_i \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

将球坐标 r, θ, φ 上的节点分别用 r_i, θ_j, φ_k 标记,坐标 r 的网格间距级别的小量定义为 ϵ , 根据

Taylor 展开,我们有

$$\left(\frac{\partial^+ \phi_i}{\partial^+ r_i} \right) = \left(\frac{\partial \phi}{\partial r} \right)_i + \frac{1}{2} (\delta^+ r_i) \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} \right)_i + O(\epsilon^2),$$

$$\left(\frac{\partial^- \phi_i}{\partial^- r_i} \right) = \left(\frac{\partial \phi}{\partial r} \right)_i - \frac{1}{2} (\delta^- r_i) \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} \right)_i + O(\epsilon^2).$$

考虑到 $2\delta r_i = \delta^+ r_i + \delta^- r_i$, 可解出

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial r} \right)_i = \frac{\delta^- r_i}{2\delta r_i} \left(\frac{\partial^+ \phi_i}{\partial^+ r_i} \right) + \frac{\delta^+ r_i}{2\delta r_i} \left(\frac{\partial^- \phi_i}{\partial^- r_i} \right) + O(\epsilon^2);$$

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} \right)_i = \frac{1}{\delta r_i} \left[\left(\frac{\partial^+ \phi_i}{\partial^+ r_i} \right) - \left(\frac{\partial^- \phi_i}{\partial^- r_i} \right) \right] + O(\epsilon^2).$$

由此,用二阶精度的中心差分,我们可得

$$\begin{aligned} [P_1 \phi]_i &= \Delta_1 \phi_i = \frac{1}{\delta r_i} \left(\frac{\partial^+ \phi_i}{\partial^+ r_i} - \frac{\partial^- \phi_i}{\partial^- r_i} \right) + \\ &\quad \left[\frac{Z(r_i)}{r_i} \left(\frac{\delta^- r_i}{\delta r_i} \frac{\partial^+ \phi_i}{\partial^+ r_i} + \frac{\delta^+ r_i}{\delta r_i} \frac{\partial^- \phi_i}{\partial^- r_i} \right) \right] = \\ &\quad \sigma_1 \phi_{i+1} + \sigma_2 \phi_{i-1} - (\sigma_1 + \sigma_2) \phi_i \end{aligned} \quad (6)$$

类似地,我们有

$$\begin{aligned} [P_2 \phi]_{i,j} &= \Delta_2 \phi_j = \frac{Z(r_i)}{r_i^2} \left(\frac{\partial^+ \phi_j}{\partial^+ \theta_j} + \frac{\partial^- \phi_j}{\partial^- \theta_j} \right) + \\ &\quad \left[\frac{Z(r_i)Z(\theta_j)\cot\theta_j}{2r_i^2} \left(\frac{\delta^- \theta_j}{\delta \theta_j} \frac{\partial^+ \phi_{j+1}}{\partial^+ \theta_j} + \frac{\delta^+ \theta_j}{\delta \theta_j} \frac{\partial^- \phi_{j-1}}{\partial^- \theta_j} \right) \right] = \\ &\quad \sigma_3 \phi_{j+1} + \sigma_4 \phi_{j-1} - (\sigma_3 + \sigma_4) \phi_j \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} [P_3 \phi]_{i,j,k} &= \Delta_3 \phi_k = \\ &\quad \frac{Z(r_i)Z(\theta_j)}{r_i^2 \sin^2 \theta_j} \left(\frac{\partial^+ \phi_k}{\partial^+ \varphi_k} - \frac{\partial^- \phi_k}{\partial^- \varphi_k} \right) = \\ &\quad \sigma_5 \phi_{k+1} + \sigma_6 \phi_{k-1} - (\sigma_5 + \sigma_6) \phi_k \end{aligned} \quad (8)$$

要说明的是,在这些差分表达式中,为简单起见我们忽略了算子作用下变量 ϕ 的不变下标,故离散方程的系数是

$$\left. \begin{aligned} \sigma_1 &= \frac{1}{\delta r_i \delta^+ r_i} \left(1 + \frac{Z(r_i) \delta^- r_i}{r_i} \right) \\ \sigma_2 &= \frac{1}{\delta r_i \delta^- r_i} \left[1 - \frac{Z(r_i) \delta^+ r_i}{r_i} \right] \\ \sigma_3 &= \frac{Z(r_i)}{r_i^2 \delta \theta_j \delta^+ \theta_j} \left(1 + \frac{\delta^- \theta_j Z(\theta_j) \cot \theta_j}{2} \right) \\ \sigma_4 &= \frac{Z(r_i)}{r_i^2 \delta \theta_j \delta^- \theta_j} \left[1 - \frac{\delta^+ \theta_j Z(\theta_j) \cot \theta_j}{2} \right] \\ \sigma_5 &= \frac{Z(r_i)Z(\theta_j)}{r_i^2 \sin^2 \theta_j} \cdot \left(\frac{1}{\delta \phi_k \delta^+ \phi_k} \right) \\ \sigma_6 &= \frac{Z(r_i)Z(\theta_j)}{r_i^2 \sin^2 \theta_j} \cdot \left(\frac{1}{\delta \phi_k \delta^- \phi_k} \right) \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

我们把 Poisson 方程(1)的离散残差定义为

$$\text{Res}_{ijk} = 1 + \Delta_1 \phi_i + \Delta_2 \phi_j + \Delta_3 \phi_k \quad (10)$$

数值计算过程中,划分网格时,球坐标 r, θ, φ 上

的节点数分别取 $N_i=191, N_j=75, N_k=64$, 同时也注意到要把圆形射流边界区域网格加密: 在 $\theta=\pm\theta_b$ 附近, 用等比级数式节点排列, 等比因子取为 0.875, 加密网格数为 14; 在 $\theta=0$ 附近, 相应的等比因子为 0.985, 加密网格数为 3; 在射流喷口处, $R=7$, 等比因子用 0.985, 加密网格数为 51. 而 φ 的网格是均匀的. Bi-CGSTAB 迭代求解的收敛准则是

$$\Sigma \leq 10^{-9} \quad (11)$$

式中,

$$\Sigma = \frac{1}{N_t} \left[\sum_{i=2}^{N_i-1} \sum_{j=2}^{N_j-1} \sum_{k=2}^{N_k-1} \text{Res}_{ijk}^2 \right]^{1/2},$$

$$N_t = (N_i - 2)(N_j - 2)(N_k - 2).$$

当球坐标网格数如上所述时, 采用 Bi-CGSTAB 方法计算, 得到了满足式 (11) 收敛准则的典型 Poisson 边值问题 (1) 的解, 在内存 3.2 GB, CPU 频率 3.3 GHz 的 PC 机上, 用时 40 s. 迭代过程中, 离散方程残差的均方根值 Σ 随迭代步数 m_{CG} 的变化, 如图 1 所示. 在 $\varphi=\pi$ 截面上, 计算得出的 ϕ 值、离散方程残差 Res 值, 如图 2 所示. 根据文献 [1] 给出的方形区域内二维 Poisson 零边值问题的解析

解可知, 图 2(a) 所示的尖峰型分布是合理的. 图 2(b) 则用来显示计算的可靠性和计算精度. 由图可见, 离散方程残差绝对值较大的节点落在极点 ($\theta=0$) 附近区域内. 为了进一步表明数值解的精度和可靠性, 表 1 给出了 $\varphi=\pi$ 截面上 12 个点的 ϕ 、Res 值, 这些值与图 2(a) 和 (b) 显示的值保持一致. 从表 1 可以看出, 在 4 个极点上, Bi-CGSTAB 方法给出的离散方程残差量级是 10^{-4} , 而在其附近区域内, 离散方程残差数量级则可达到 10^{-2} , 但最大残差小于 5%.

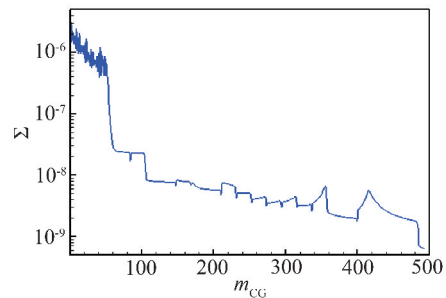


图 1 Σ 给出的迭代收敛史

Fig.1 Iterative convergence history given by Σ

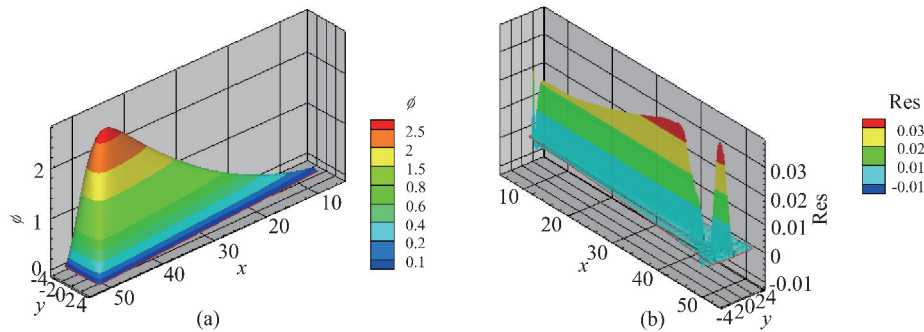


图 2 $\varphi=\pi$ 截面上的 ϕ 分布和该截面上的残差分布

Fig.2 ϕ -distribution in the plane $\varphi=\pi$ and residual distribution in the same plane

表 1 $\varphi=\pi$ 截面上 12 个节点处 Bi-CGSTAB 方法计算的 ϕ 值及残差值

Tab.1 ϕ and Res values calculated by Bi-CGSTAB at 12th point in the plane $\varphi=\pi$

θ	r_1^*	r_2	r_3	r_4	r_1	r_2	r_3	r_4
	ϕ				$\text{Res} \cdot 10^3$			
0	0.745 60	0.967 56	1.907 2	2.215 4	0.275 27	0.300 40	0.397 04	0.386 11
0.002 30	0.743 96	0.965 43	1.903 0	2.211 2	25.642	27.606	34.513	31.348
0.004 65	0.741 24	0.961 91	1.896 1	2.204 4	0.951 96	1.150 1	1.992 0	-1.943 7

* $r_1=18.001, r_2=22.101, r_3=35.634, r_4=49.482$.

图 3 给出了 $\varphi=\pi$ 时 ϕ 、Res 的等值线, 其中 $x=r\cos\theta, y=r\sin\theta, \phi$ 的峰值出现在点 ($r=47, \theta=0$) 附近, 而 Res 绝对值的峰值的确局限于极点附

近的狭窄区域. 图 4 则显示了当 $r=r_k (k=1, 2, 3, 4)$ 时横截面内 ϕ 的等值线, 说明极点处有峰值, 与表 1 给出的值是一致的.

2 结论

本文的主要意义在于,说明用常用的近似因子分解,计算球坐标系下的 Poisson 方程时,存在极点处理

的问题;而用 Bi-CGSTAB 方法可以找到球坐标系下的 Poisson 方程零边值问题的近似解,这有利于研究湍流射流时求解压力 Poisson 方程。

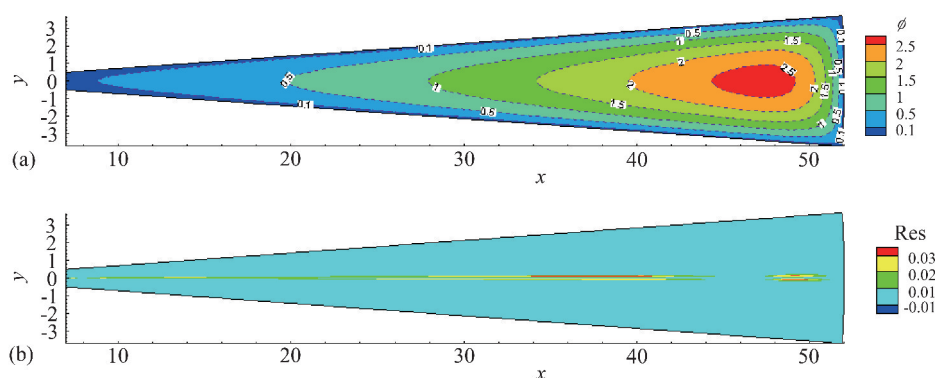


图 3 $\phi=\pi$ 时 ϕ 的等值线和 $\phi=\pi$ 时残差 Res 的等值线

Fig.3 ϕ -contours in $\phi=\pi$ and res-contours in $\phi=\pi$

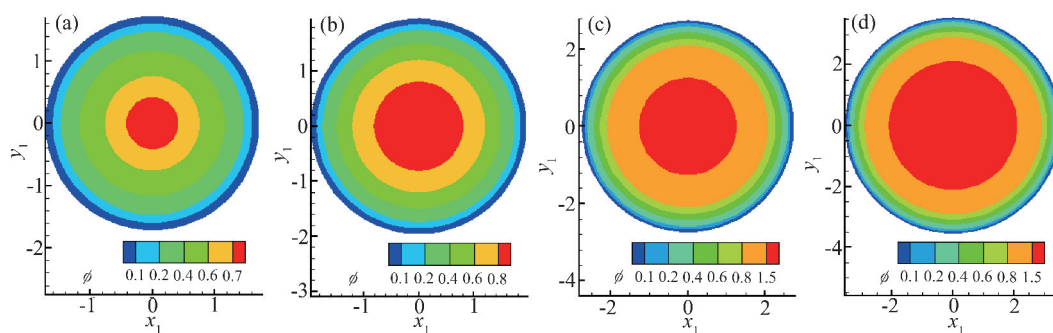


图 4 当 $r=r_k$ ($k=1,2,3,4$) 时横截面内的 ϕ 等值线

Fig.4 ϕ -contours in cross sections $r=r_k$ ($k=1,2,3,4$) (a-d)

参考文献 (References)

- [1] 朱祚金. 柱和柱群绕流的数值模拟[D]. 上海: 上海交通大学, 1990.
- [2] BAKER T J. Potential flow calculation by approximation factorization method [J]. Journal of Computational Physics, 1981, 42(1): 1-19.
- [3] NIU J L, ZHU Z J. Numerical study of three-dimensional flows around two identical square cylinders in staggered arrangement[J]. Physics of Fluid, 2006, 18(4): 044106(1-14).
- [4] SUN X W, CHAN C K, MEI B W, et al. LES of convective heat transfer and incompressible fluid flow past a square cylinder[J]. Numerical Heat Transfer, Part A: Applications, 2016, 69(10): 1106-1124.
- [5] VUIK C, SEGAL A, MEIJERINKY J A. An efficient preconditioned CG method for the solution of a class of layered problems with extreme contrasts in the coefficients [J]. Journal of Computational Physics, 1999, 152(1): 385-403.
- [6] VAN DER VORST H A. BI-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of BI-CG for the solution of nonsymmetric linear systems[J]. SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, 1992, 13(2): 631-644.