一种求解二维扩散方程的分块隐式格式*1)

李 文 志

(中国科学院计算数学与科学工程计算研究所)

A BLOCK IMPLICIT SCHEME FOR 2-D DIFFUSION EQUATIONS

Li Wenzhi

(Institute of Computational Mathematics and Scientifical Engineering Computing Chinese Academy of Sciences)

Abstract

In this paper, the author proposed a Block Implicit Scheme for 2-D Diffusion Equations. It combines classical explicit scheme, classical implicit scheme and Crank-Nicolson scheme, and has obvious parallelism, high accuracy and stability. A numerical example is given in the paper.

1. 引　　言

我们考虑求解如下二维扩散方程初边值问题的有限差分格式:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t}=\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}+f_0(x, y, t), \\ u(x, y, 0)=u_0(x, y),\ 0\leqslant x\leqslant a, \\ u(0, y, t)=f_1(y, t),\quad 0\leqslant y\leqslant b, \\ u(a, y, t)=f_2(y, t),\quad 0<t<\infty, \\ u(x, 0, t)=f_3(x, t), \\ u(x, b, t)=f_4(x, t). \end{cases} \tag{1}$$

假定它有足够光滑的解 $u(x, t)$.

现在已有几种求解该问题的方法，同时具有良好的稳定性与并行性. 一种是，G. R. Gane 与 A. R. Gourlay 建立的分块跳点格式[1,2]，简记为 BHA (Block Hopscotch Algorithm). 另一方面 Evans 与 Abdullah 基于 Saul'yev 非对称格式提出了交替分组显式方法(AGE)[3,4]，然后张宝琳建立了分块显隐交替法[5]，简记为 ABE-I (Alternating Block Explicit-Implicit Method). 所有这些方法都具有很好的稳定性与并行性，但是它们的截断误差含有时间方向的一阶项，这是不能令人满意的. 另外，Peaceman 与

* 1995年2月16日收到.

1) 国家自然科学基金资助项目.

Rachford 在[6] 中提出的交替方向隐式方法(Alternating−Direction Implicit，简记ADI)具有一些相当好的性质，但是对于多指令流多数据流(MIMD)并行机来说，由于每个并行处理器在奇数时间层计算一列或若干列的数值，而在偶数时间层计算一行或若干行的数值，或者是相反，因而在每个时间层，大部分数据需要从一个处理器传送到另一个处理器．这是很不经济的．本文提出了一种分块隐式格式，具有良好的稳定性与并行性，以及较高的精度．

2. 分块隐式格式

令 Δx，Δy，Δt 分别为 x，y 及 t 方向的网格步长，其中 $\Delta x=a/m$，$\Delta y=b/n$，m 与 n 为正整数．$x_i=i\Delta x$，$y_j=j\Delta y$，$i=0,1,\cdots,m$；$j=0,1,\cdots,n$；$t_k=k\Delta t$，$k=1,2,\cdots$．问题(1)在点 (x_i, y_j, t_k) 处的近似值记为 $u^k_{i,j}$．在下文中，点 (x_i, y_j, t_k) 记作 (i, j, k)．

我们再引入如下记号：

$$\delta^2_x u^k_{i,j}=\frac{u^k_{i-1,j}-2u^k_{i,j}+u^k_{i+1,j}}{\Delta^2 x},$$

$$\delta^2_y u^k_{i,j}=\frac{u^k_{i,j-1}-2u^k_{i,j}+u^k_{i,j+1}}{\Delta^2 y}.$$

(1)式中方程的一种通常的离散化为

$$\begin{aligned}\frac{u^{k+1}_{i,j}-u^k_{i,j}}{\Delta t}&=(1-\theta)[\delta^2_x u^k_{i,j}+\delta^2_y u^k_{i,j}+f_0(x_i, y_j, t_k)]\\&\quad+\theta[\delta^2_x u^{k+1}_{i,j}+\delta^2_y u^{k+1}+f_0(x_i, y_j, t_{k+1})].\end{aligned}\tag{2}$$

众所周知，若 $\theta=0$，则(2)是古典显式格式，具有最好的并行性，但是它的稳定性条件过于苛刻：$\Delta t/\Delta^2 x+\Delta t/\Delta^2 y\leqslant 1/2$．当 $\theta=1$ 或 $1/2$ 时，(2)分别是古典隐式格式与Crank−Nicolson 格式．它们都具有无条件稳定性，后者还具有二阶精度，但是它们没有明显的并行性．我们的新方法结合了这二者的优点．

设第 n 时间层的值 $u^n_{i,j}(i=1,2,\cdots,m-1;\ j=1,2,\cdots,n-1)$ 已知，第 $n+1$ 时间层的值 $u^{n+1}_{i,j}$ 待求．

设 s 为一满足 $1<2s\leqslant m-1$ 的正整数，I_l，$l=1,2,\cdots,2s$，为满足 $1\leqslant I_1<I_2<\cdots<I_{2s}\leqslant m-1$ 的 $2s$ 个整数．后面将证明：对任意的 s 与 $I_l(l=1,2,\cdots,2s)$，下述的混合方法保持其稳定性．

若 n 为偶数，我们采用古典显式格式计算 $u^{n+1}_{i,j}(i=I_1, I_3, \cdots, I_{2s-1}, j=1,2,\cdots,n-1)$，采用古典隐式格式计算 $u^{n+1}_{i,j}(i=I_2, I_4, \cdots, I_{2s};\ j=1,2,\cdots,n-1)$，而采用 Crank−Nicolson 格式计算其它的 $u^{n+1}_{i,j}$．若 n 为奇数，我们采用古典隐式格式计算 $u^{n+1}_{i,j}(i=I_1, I_3, \cdots, I_{2s-1};\ j=1,2,\cdots,n-1)$，采用古典显式格式计算 $u^{n+1}_{i,j}(i=I_2, I_4, \cdots, I_{2s};\ j=1,2,\cdots,n-1)$，而采用 Crank−Nicolson 格式计算其它的 $u^{n+1}_{i,j}$．

我们引入如下记号：

$$r_1=\frac{\Delta t}{\Delta^2 x},$$

$$r_2=\frac{\Delta t}{\Delta^2 y},$$

$$\mathbf{u}^k=(u^k_{1,1},\ \cdots,\ u^k_{1,n-1};\ u^k_{2,1},\ \cdots,\ u^k_{m-1,n-1})^T.$$

于是方法的矩阵实现可以写成

$$\begin{cases}(E+D_1A)\mathbf{u}^{k+1}=(E-D_2A)\mathbf{u}^k+\mathbf{f}^k,\\(E+D_2A)\mathbf{u}^{k+2}=(E-D_1A)\mathbf{u}^{k+1}+\mathbf{f}^{k+1},\end{cases}\quad k=0,2,4,\cdots,\tag{3}$$

其中 E 为 $(m-1)\times(n-1)$ 阶单位阵，$\mathbf{f}^k$ 是由(1)式中的 $f_i(x,\ y,\ t)(i=0,1,\cdots,\ 5)$ 所确定的列向量，D_1 与 D_2 都是 $(m-1)\times(n-1)$ 阶对角阵且满足 $D_1+D_2=E$. D_1 可以写成 $\mathrm{diag}(\theta_{1,1},\cdots,\theta_{1,n-1};\ \theta_{2,1},\ \cdots,\ \theta_{m-1,\ n-1})$，其中

$$\theta_{i,j}=\begin{cases}0,\quad i=I_{2l},\ 0<l\leqslant s,\\1,\quad i=I_{2l-1},\ 0<l\leqslant s,\\\dfrac{1}{2},\ \text{elsewhere}.\end{cases}\tag{4}$$

A 是 $(m-1)\times(n-1)$ 阶对称正定方阵，由下式给出：

$$A=\begin{bmatrix}A_{n-1} & -r_1E_{n-1} & & & \\ -r_1E_{n-1} & A_{n-1} & -r_1E_{n-1} & & \\ & \cdots & \cdots & \cdots & \\ & & -r_1E_{n-1} & A_{n-1} & -r_1E_{n-1}\\ & & & -r_1E_{n-1} & A_{n-1}\end{bmatrix},\tag{5}$$

其中 E_{n-1} 是 $n-1$ 阶单位阵. A_{n-1} 则由下式给出：

$$A_{n-1}=\begin{bmatrix}2r_1+2r_2 & -r_2 & & & \\ -r_2 & 2r_1+2r_2 & -r_2 & & \\ & \cdots & \cdots & \cdots & \\ & & -r_2 & 2r_1+2r_2 & -r_2\\ & & & -r_2 & 2r_1+2r_2\end{bmatrix}_{(n-1)}.$$

3. $A^{\frac{1}{2}}$ – 稳定性

下面我们将证明我们的方法具有 $A^{\frac{1}{2}}$ – 稳定性，也就是说，在向量范数

$$\|\mathbf{u}\|_{A^{\frac{1}{2}}}=\|A^{\frac{1}{2}}\mathbf{u}\|_2\tag{6}$$

下(其中 A 是 $(m-1)\times(n-1)$ 阶对称正定阵)，截断误差的传播不会超过它本身的 C 倍. C 为与时间步数无关的常数. 见 G. R. Gane[1]. 本文中，A 由(5)式给出.

由(3)式得到

$$\mathbf{u}^{k+2}=T\mathbf{u}^{k}+g^{k}, \tag{7}$$

其中

$$T=(E+D_2A)^{-1}(E-D_1A)(E+D_1A)^{-1}(E-D_2A), \tag{8}$$

$$g^k=(E+D_2A)^{-1}(E-D_1A)(E+D_1A)^{-1}f^{k}+(E+D_2A)^{-1}f^{k+1}.$$

记

$$\mathbf{v}^k=A^{\frac{1}{2}}\mathbf{u}^k,$$

$$B_1=A^{\frac{1}{2}}D_1A^{\frac{1}{2}}, \tag{9}$$

$$B_2=A^{\frac{1}{2}}D_2A^{\frac{1}{2}}, \tag{10}$$

$$S=A^{\frac{1}{2}}TA^{\frac{1}{2}}.$$

于是由(7)和(8)可以得到

$$\mathbf{v}^{k+2}=S\mathbf{v}^k+A^{\frac{1}{2}}g^k, \tag{11}$$

$$S=(E+B_2)^{-1}(E-B_1)(E+B_1)^{-1}(E-B_2). \tag{12}$$

对任意正整数 p,

$$S^p=(E+B_2)^{-1}\{(E-B_1)(E+B_1)^{-1}(E-B_2)(E+B_2)^{-1}\}^{p-1}$$
$$(E-B_1)(E+B_1)^{-1}(E-B_2).$$

由(9)和(10)知 B_1 和 B_2 都是非负定对称阵. 应用 Kellogg 引理[7], 得到

$$\|(E-B_i)(E+B_i)^{-1}\|_2\leqslant 1,\ i=1,2. \tag{13}$$

因此

$$\|S^p\|_2\leqslant\|E-B_2\|_2\leqslant 1+2r_1+2r_2,$$

这表明在 $A^{\frac{1}{2}}$ 范数下, 方法是稳定的, 即具有 $A^{\frac{1}{2}}$ - 稳定性.

4. 精度与并行性

为了使方法具有好的精度, 我们通常取 s 的值远小于 m. 因此在绝大多数点上, 使用的是 Crank-Nicolson 格式. 如果 s 为常数, 截断误差总体上是二阶的.

为了使方法具有好的并行性, 通常取 $I_{2l}-I_{2l-1}(0<l\leqslant s)$ 与 $I_{2l+1}-I_{2l}$ 均为常数(对于不同的 l 来说), 并且 $I_{2l+1}-I_{2l}(0<l<s)$ 近似等于 I_1 及 $m-I_{2s}$. 前一个常数一般取为 1 或 2, 后一个常数近似为 $(m-1)/(s+1)$. 在下面的算例中, 我们取前一个常数为 2. 这样我们可以使用 $(s+1)$ 个并行处理器进行计算. 每个并行处理器在每个时间步采用块超松弛迭代法解一个块三对角方程组. 方法的并行性与分块跳点格式类似.

现在给出一个数值例子. 取(1)的初值与边值使其有如下精确解

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

表 1 相对误差比较(单位：10^{-3})

$r=1.0$，$\Delta x=\Delta y=0.02$，$\Delta t=0.0004$ 250时间步，$t=0.1$，$y=0.5$

x_i	ABE−I	BHA	
0.1	0.1528	0.2624	0.2011
0.2	0.2174	0.3101	0.2472
0.3	0.3317	0.3943	0.3128
0.4	0.8278	0.2963	0.2362
0.5	0.7631	0.2488	0.1901
0.6	0.8280	0.2967	0.2362
0.7	0.3320	0.3950	0.3440
0.8	0.2178	0.3109	0.2473
0.9	0.1534	0.2635	0.2016
Maximum	6.5124	0.4277	0.3534

表 2 相对误差比较(单位：10^{-2})

$r=2.0$，$\Delta x=\Delta y=0.02$，$\Delta t=0.0008$ 125时间步，$t=0.1$，$y=0.5$

x_i	ABE−I	BHA	
0.1	0.2746	0.2863	0.2767
0.2	0.3013	0.3054	0.2953
0.3	0.3484	0.3390	0.3341
0.4	0.5456	0.3251	0.2908
0.5	0.5189	0.3063	0.2721
0.6	0.5456	0.3257	0.2905
0.7	0.3484	0.3402	0.3212
0.8	0.3013	0.3066	0.2948
0.9	0.2747	0.2876	0.2763
Maximum	1.6759	0.3602	0.3357

在计算中，取 $m=n=50$，$s=2$，$t=0.1$. 表 1 与表 2 分别给出了 $r_1=r_2=1.0$，250 个时间步与 $r_1=r_2=2.0$，125 个时间步的计算结果的相对误差比较. 三种方法的分块(组)方式大致相同. 对于分块显隐交替法(ABE−I)，我们在 $i=16$，17，33，34 的点上交替使用 4 种非对称格式，在其它点处交替使用古典显式格式与古典隐式格式. 对于分块跳点格式(BHA)，分为三段：$1\leqslant i\leqslant 17$，$18\leqslant i\leqslant 33$，$34\leqslant i\leqslant 49$. 对于分块隐式方法(Block Implicit Method)，取 $I_1=15$，$I_2=17$，$I_3=33$，$I_4=35$.

作者对北京应用物理与计算数学研究所的张宝琳老师提供资料与指导表示感谢!

参 考 文 献

[1] G. R. Gane, Ph. D. thesis, Loughborough Univ. of Technology, 1974.

[2] G. R. Gane, A. R. Gourlay, Block Hopscotch Procedures for Second Order Parabolic Differential Equations, J. Inst. Maths. Applics., V. 19 (1977), 205—216.

[3] A. R. Abudullah, D. J. Evans, Fast Group Explicit Algorithms for Diffusion Problems, Intern. J. Computer Math., V. 20 (1987), 181—197.

[4] D. J. Evans, Alternating Group Explicit Method for the Diffusion Equation, Appl. Math. Modelling, V. 9 (1985), 201—216.

[5] Zhang Baolin, Su Xiumin, Alternating Block Explicit-Implicit Method For the Two-Dimensional Diffusion Equation, Intern. J. Computer Math. 38 (1991), 241—255.

[6] D. W. Peaceman, H. H. Rachford, The Numerical Solution of Parabolic and Elliptic Differential Equations, J. Soc. Ind. Appl. Math. 3 (1955), 28—41.

[7] K. B. Kellogg, An Alternating Direction Method for Operator Equations, SIAM 12, No.4 (1964).