第 21 卷　第 4 期　　华侨大学学报(自然科学版)　　Vol. 21　No. 4
2000 年 10 月　　Journal of Huaqiao University (Natural Science)　　Oct. 2000

文章编号　1000-5013(2000)04-349-05

# 三维扩散方程的单点子域精细积分法

曾　文　平

(华侨大学管理信息科学系, 泉州 362011)

摘要　建立三维扩散方程的单点子域精细积分法, 并通过稳定性分析, 表明单点子域精细积分法相对于差分法的优越性.

关键词　差分法, 单点子域精细积分法, 稳定性分析, 三维扩散方程

中图分类号　O 241.82　　　文献标识码　A

扩散问题或非稳定态热传导问题, 均可以用抛物型偏微分方程表示. 这类方程一般用有限差分法求解, 有各种不同的差分格式. 差分近似自然而简单, 然而将微分算子化为差分算子却带来了稳定性与精度问题[~3]. 为此, 文[4, 5]对一、二维扩散方程提出了子域精细积分法, 对不太大的时间步长 $\Delta t$ 精度损失不大. 本文对三维扩散方程提出了单点子域精细积分法, 并进行了稳定性分析, 表明了单点子域积分法相对于差分法的优越性.

## 1　单点子域精细积分的 FTCS 格式

考虑三维扩散方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}\right) \qquad (a > 0 \text{的常数}) \tag{1}$$

的初值问题. 对函数 $u$ 在 $x, y, z$ 方向离散, 为方便起见, 设步长 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \frac{1}{M}$, $x_i = i\Delta x$, $y_j = j\Delta y$, $z_k = k\Delta z$ 及 $i, j, k = 0, 1, \cdots, M$. 于是, 得常微分方程组为

$$\frac{\mathrm{d}u_{i,j,k}}{\mathrm{d}t} + \frac{6a}{(\Delta x)^2}u_{i,j,k} = \frac{a}{(\Delta x)^2}\{(u_{i+1,j,k} + u_{i-1,j,k}) + (u_{i,j+1,k} + u_{i,j-1,k}) + (u_{i,j,k+1} + u_{i,j,k-1})\} \qquad (i, j, k = 1, 2, \cdots, M), \tag{2}$$

其中 $u_{i,j,k} = u(x_i, y_j, z_k)$. 式(2)的解为

$$u_{i,j,k}(t) = \mathrm{e}^{-\frac{6at}{(\Delta x)^2}}u^0_{i,j,k} + \frac{a}{(\Delta x)^2}\int \mathrm{e}^{-\frac{6a}{(\Delta x)^2}(t-s)}\{u_{i+1,j,k}(s) + u_{i-1,j,k}(s) + u_{i,j+1,k}(s) + u_{i,j-1,k}(s) + u_{i,j,k+1}(s) + u_{i,j,k-1}(s)\}\mathrm{d}s. \tag{3}$$

对时间坐标离散化, 步长为 $\Delta t$, 第 $n$ 个离散点 $t_n = n\Delta t$ 上的 $u_{i,j,k}$ 值用 $u^n_{i,j,k}(n = 0, 1, 2, \cdots)$

收稿日期　2000-05-14　　作者简介　曾文平(1940-), 男, 教授

基金项目　福建省自然科学基金资助项目

表示,则有

$$u_{i,j,k}^{n+1}=e^{-6r}u_{i,j,k}^{n}+\frac{a}{(\Delta x)^2}\int_{n}^{n+1}e^{-\frac{6a}{(\Delta x)^2}(t_{n+1}-S)}\{u_{i+1,j,k}(s)+$$
$$u_{i-1,j,k}(s)+u_{i,j+1,k}(s)+u_{i,j-1,k}(s)+u_{i,j,k+1}(s)+u_{i,j,k-1}(s)\}\mathrm{d}s,\tag{4}$$

其中 $r=a\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}=a\frac{\Delta t}{(\Delta y)^2}=a\frac{\Delta t}{(\Delta z)^2}$. 这就是方程组(1)的单内点子域精细积分公式.

式(4)中被积函数中的 $\{u_{i+1,j,k}(s)+u_{i-1,j,k}(s)+u_{i,j+1,k}(s)+u_{i,j-1,k}(s)+u_{i,j,k+1}(s)+u_{i,j,k-1}(s)\}$,可以有多种近似替代办法. 现假定它为常数值 $u_{i+1,j,k}^n+u_{i-1,j,k}^n+u_{i,j+1,k}^n+u_{i,j-1,k}^n+u_{i,j,k+1}^n+u_{i,j,k-1}^n$,代入式(4)便得三维扩散方程(1)的单点子域积分的 FTCS(Front Time Central Space)格式. 即

$$u_{i,j,k}^{n+1}=e^{-6r}u_{i,j,k}^{n}+\frac{1}{6}(1-e^{-6r})\{u_{i+1,j,k}^n+u_{i-1,j,k}^n+$$
$$u_{i,j+1,k}+u_{i,j-1,k}+u_{i,j,k+1}+u_{i,j,k-1}\}.\tag{5}$$

现采用 Von Neumann 方法推导其稳定性条件. 令 $u_{i,j,k}^n=\rho^n e^{i^*(p\pi x_i+q\pi y_j+l\pi z_k)}$,其中 $i^*=\sqrt{-1}$, $p,q,l$ 为任意实数. 将它代入 FTCS 格式(5),得传播因子

$$\rho=\lambda+\frac{1}{3}(1-\lambda)\{\cos p\pi\Delta x+\cos q\pi\Delta y+\cos l\pi\Delta z\},\tag{6}$$

其中 $\lambda=e^{-6r}$,故 $0<\lambda<1$. 因此, $|\rho|=\left|\lambda+\frac{1}{3}(1-\lambda)\{\cos p\pi\Delta x+\cos q\pi\Delta y+\cos l\pi\Delta z\}\right|\le 1$,从而 FTCS 格式无条件稳定.

下面再分析子域积分 FTCS 格式与差分 FTCS 格式的关系. 采用近似代替

$$\lambda=e^{\frac{-6a\Delta t}{(\Delta x)^2}}\approx 1-6a\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2},\tag{7}$$

此即 $\lambda=e^{-6r}\approx 1-6r$. 代入子域积分 FTCS 格式(5),便得差分的 FTCS 格式

$$\frac{u_{i,j,k}^{n+1}-u_{i,j,k}^{n}}{\Delta t}=\frac{a}{(\Delta x)^2}\{(u_{i+1,j,k}^n-2u_{i,j,k}^n+u_{i-1,j,k}^n)+$$
$$(u_{i,j+1,k}^n-2u_{i,j,k}^n+u_{i,j-1,k}^n)+(u_{i,j,k+1}^n-2u_{i,j,k}^n+u_{i,j,k-1}^n\}.\tag{8}$$

它要求 $\frac{6a\Delta t}{(\Delta x)^2}\le 1$,即 $r\le\frac{1}{6}$ 时,格式才稳定.

近似式(7)是不恰当的,因为它不能保证条件 $0<\lambda<1$. 如果一定要采用近似避免计算指数函数,也应采用 $\lambda=e^{-6r}=\frac{1}{e^{6r}}\simeq\frac{1}{1+6r}$ 或 $\lambda=e^{-6r}=\frac{e^{-3r}}{e^{3r}}\simeq\frac{1-3r}{1+3r}$,它们均能保证 $0<\lambda<1$ 对任意 $r>0$ 永远成立.

然而, FTCS 格式的精度只是 $\Delta t$ 的一阶. 因此,应当寻找 $(\Delta t)^2$ 精度的积分格式. 例如,蛙跳格式及隐式 Crank-Nicolson 格式都是 $(\Delta t)^2$ 精度的. 我们将在后面给予介绍.

## 2 Crank-Nicolson 隐式格式

如果把式(2)右端看为常数值 $\frac{a}{(\Delta x)^2}\{\frac{u_{i+1,j,k}^{n+1}+u_{i+1,j,k}^{n}}{2}+\frac{u_{i-1,j,k}^{n+1}+u_{i-1,j,k}^{n}}{2}+\frac{u_{i,j+1,k}^{n+1}+u_{i,j+1,k}^{n}}{2}+\frac{u_{i,j-1,k}^{n+1}+u_{i,j-1,k}^{n}}{2}+\frac{u_{i,j,k+1}^{n+1}+u_{i,j,k+1}^{n}}{2}+\frac{u_{i,j,k-1}^{n+1}+u_{i,j,k-1}^{n}}{2}\}$,则式(2)的解为

$$u_{i,j,k}(t)=\mathrm{e}^{-6\frac{a}{(\Delta x)^2}t}u^0_{i,j,k}+\frac{a}{2(\Delta x)^2}\int\mathrm{e}^{-\frac{6a}{(\Delta x)^2}(t-s)}\{u^{n+1}_{i+1,j,k}+u^{n+1}_{i-1,j,k}+u^{n+1}_{i,j+1,k}+u^{n+1}_{i,j-1,k}+u^{n+1}_{i,j,k+1}+u^{n+1}_{i,j,k-1}+u^n_{i+1,j,k}+u^n_{i-1,j,k}+u^n_{i,j+1,k}+u^n_{i,j-1,k}+u^n_{i,j,k+1}+u^n_{i,j,k-1}\}\mathrm{d}s.$$

由此可得

$$u^{n+1}_{i,j,k}=\mathrm{e}^{-6r}u^n_{i,j,k}+\frac{a}{2(\Delta x)^2}\int_n^{n+1}\mathrm{e}^{-\frac{6a}{(\Delta x)^2}(t_{n+1}-s)}\{u^{n+1}_{i+1,j,k}+u^{n+1}_{i-1,j,k}+u^{n+1}_{i,j+1,k}+u^{n+1}_{i,j-1,k}+u^{n+1}_{i,j,k+1}+u^{n+1}_{i,j,k-1}+u^n_{i+1,j,k}+u^n_{i-1,j,k}+u^n_{i,j+1,k}+u^n_{i,j-1,k}+u^n_{i,j,k+1}+u^n_{i,j,k-1}\}\mathrm{d}s.$$

于是, 可得 Crank-Nicolson 型精细积分格式

$$u^{n+1}_{i,j,k}=\mathrm{e}^{-6r}u^n_{i,j,k}+\frac{1}{12}(1-\mathrm{e}^{-6r})\{u^{n+1}_{i+1,j,k}+u^{n+1}_{i-1,j,k}+u^{n+1}_{i,j+1,k}+u^{n+1}_{i,j-1,k}+u^{n+1}_{i,j,k+1}+u^{n+1}_{i,j,k-1}+u^n_{i+1,j,k}+u^n_{i-1,j,k}+u^n_{i,j+1,k}+u^n_{i,j-1,k}+u^n_{i,j,k+1}+u^n_{i,j,k-1}\}. \tag{9}$$

由 Von Neumann 方法可得格式(9) 的传播因子为

$$\rho=\frac{\lambda+\frac{1}{6}(1-\lambda)(\cos p\pi\Delta x+\cos q\pi\Delta y+\cos l\pi\Delta z)}{1-\frac{1}{6}(1-\lambda)(\cos p\pi\Delta x+\cos q\pi\Delta y+\cos l\pi\Delta z)}. \tag{10}$$

因 $0<\lambda=\mathrm{e}^{-6r}<1$, 易知 $|\rho|\leq 1$ 对任意 $r>0$ 均成立. 即 Crank-Nicolson 型精细积分格式(9) 无条件稳定. 若取近似式 $\mathrm{e}^{-6r}=\frac{\mathrm{e}^{-3r}}{\mathrm{e}^{3r}}\simeq\frac{1-3r}{1+3r}$, 代入格式(9) 经整理得著名的 Crank-Nicolson 隐式差分格式为

$$\frac{u^{n+1}_{i,j,k}-u^n_{i,j,k}}{\Delta t}=\frac{a}{(\Delta x)^2}\{(\delta_x^2+\delta_y^2+\delta_z^2)(u^{n+1}_{i,j,k}+u^n_{i,j,k})\}, \tag{11}$$

其中 $\delta_x^2,\delta_y^2,\delta_z^2$ 分别表示关于 $x,y,z$ 方向的二阶中心差分, 例如 $\delta_x^2u^n_{i,j,k}=u^n_{i+1,j,k}-2u^n_{i,j,k}+u^n_{i-1,j,k}$, 等等.

## 3 蛙跳格式

如果对式(2) 从 $t_{n-1}$到 $t_{n+1}$积分, 则有

$$u^{n+1}_{i,j,k}=\mathrm{e}^{-12r}u^{n-1}_{i,j,k}+\frac{a}{(\Delta x)^2}\int_{n-1}^{n-1}\mathrm{e}^{-\frac{6a}{(\Delta x)^2}(t_{n+1}-s)}\{u_{i+1,j,k}(s)+u_{i-1,j,k}(s)+u_{i,j+1,k}(s)+u_{i,j-1,k}(s)+u_{i,j,k+1}(s)+u_{i,j,k-1}(s)\}\mathrm{d}s. \tag{12}$$

若在式(12) 中, 取 $u_{i+1,j,k}(s)+u_{i-1,j,k}(s)+u_{i,j+1,k}(s)+u_{i,j-1,k}(s)+u_{i,j,k+1}(s)+u_{i,j,k-1}(s)\equiv u^n_{i+1,j,k}+u^n_{i-1,j,k}+u^n_{i,j+1,k}+u^n_{i,j-1,k}+u^n_{i,j,k+1}+u^n_{i,j,k-1}$为常值, 于是可得蛙跳单点精细积分格式

$$u^{n+1}_{i,j,k}=\mathrm{e}^{-12r}u^{n-1}_{i,j,k}+\frac{1}{6}(1-\mathrm{e}^{-12r})\{u^n_{i+1,j,k}+u^n_{i-1,j,k}+u^n_{i,j+1,k}+u^n_{i,j-1,k}+u^n_{i,j,k+1}+u^n_{i,j,k-1}\}. \tag{13}$$

采用 Von Neumann 法, 可得特征方程为

$$\rho^2 - \frac{1}{3}(1-\lambda)^2(\cos p\pi\Delta x + \cos q\pi\Delta y + \cos l\pi\Delta z)\rho - \lambda^2 = 0, \tag{14}$$

其中 $\lambda = e^{-6r}$. 为证明蛙跳格式的稳定性, 我们需要如下引理.

引理　实系数二次方程 $\lambda^2 - b\lambda - c = 0$ 的根按模≤1 的充要条件是 $b \le 1 - c \le 2$.

对照引理, 此时方程(14)中, $b = \frac{1}{3}(1-\lambda^2)(\cos p\pi\Delta x + \cos q\pi\Delta y + \cos l\pi\Delta z)$, $c = \lambda^2$. 由于 $r > 0$, $0 < \lambda = e^{-6r} < 1$, 从而 $b = \frac{1}{3}(1-\lambda^2)\ \cos p\pi\Delta x + \cos q\pi\Delta y + \cos l\pi\Delta z \ \le 1 - \lambda^2 \le 2$. 因此, 方程(14)的两根按模≤1. 且根据韦达定理知, $\rho_1 \cdot \rho_2 = -c = \lambda^2 < 1$. 所以, $\rho_1 \cdot \rho_2$ 也不可能同时为 1. 根据稳定性理论知蛙跳格式(13)无条件稳定. 显然, 格式(13)也是三层格式.

单点子域积分使蛙跳格式复活, 成为二阶精度显格式. 其精度与隐式 Crank-Nicolson 格式相当, 而计算量却小得多. 这表明了单点子域精细积分对比差分算法的优越性. 此结论对三维情况也适用.

## 4　数值试验与结论

例如, 求解三维扩散方程初边值问题

$$\left.\begin{aligned}
&\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \qquad (0 \le x, y, z \le 1, t > 0),\\
&u(0,y,z,t) = e^{-3t}\sin(y+z), u(1,y,z,t) = e^{-3t}\sin(1+y+z),\\
&u(x,0,z,t) = e^{-3t}\sin(z+x), u(x,1,z,t) = e^{-3t}\sin(1+z+x),\\
&u(x,y,0,t) = e^{-3t}\sin(x+y), u(x,y,1,t) = e^{-3t}\sin(1+x+y),\\
&u(x,y,z,0) = \sin(x+y+z),
\end{aligned}\right\} \tag{15}$$

其精确解为

$$u(x,y,z,t) = e^{-3t}\sin(x+y+z). \tag{16}$$

取 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.1$, $\Delta t = 0.001\,25$, $0.001\,6\dot{6}$ 及 $0.002\,50$(此时 $r = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} = \frac{\Delta t}{(\Delta y)^2} = \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2}$ 相应地分别为 $\frac{1}{800}$, $\frac{1}{600}$ 及 $\frac{1}{400}$). 采用单点子域精细积分的 FTCS 格式(5), 以及蛙跳格式(13)计算到 $n = 200$. 同时, 将计算结果与精确解及相应的差分格式计算结果列表进行比较, 如表 1 所示.

表 1　各种格式计算结果比较表($\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.1$, $n = 200$)

| $\Delta t$ | $(x, y, z)$ | 精确解(16) | 子域精细积分 FTCS 格式(5) | 差分 FTCS 格式(8) | 子域精细积分蛙跳格式(13) | 差分蛙跳格式(17) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 0.001 25 | (0.2, 0.2, 0.2) | 0.266 718 | 0.276 915 | 0.266 694 | 0.271 016 | 溢出 |
| | (0.4, 0.4, 0.4) | 0.440 264 | 0.472 696 | 0.440 187 | 0.453 881 | |
| | (0.6, 0.6, 0.6) | 0.460 013 | 0.493 270 | 0.459 934 | 0.473 978 | |
| | (0.8, 0.8, 0.8) | 0.319 066 | 0.330 292 | 0.319 039 | 0.323 802 | |
| $0.001\,6\dot{6}$ | (0.2, 0.2, 0.2) | 0.207 720 | 0.218 927 | 0.207 690 | 0.213 596 | 溢出 |
| | (0.4, 0.4, 0.4) | 0.342 878 | 0.378 735 | 0.342 782 | 0.361 569 | |
| | (0.6, 0.6, 0.6) | 0.358 259 | 0.395 012 | 0.358 160 | 0.377 423 | |
| | (0.8, 0.8, 0.8) | 0.248 489 | 0.260 810 | 0.248 455 | 0.254 957 | |

续表

| $\Delta t$ | $(x,y,z)$ | 精确解(16) | 子域精细积分FTCS 格式(5) | 差分 FTCS 格式(8) | 子域精细积分蛙跳格式(13) | 差分蛙跳格式(17) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 0.002 50 | (0.2,0.2,0.2) | 0.125 989 | 0.137 303 | 溢出 | 0.133 743 | 溢出 |
| | (0.4,0.4,0.4) | 0.207 966 | 0.244 530 | | 0.232 855 | |
| | (0.6,0.6,0.6) | 0.217 295 | 0.254 748 | | 0.242 799 | |
| | (0.8,0.8,0.8) | 0.150 716 | 0.163 127 | | 0.159 234 | |

值得注意两点(1) 差分蛙跳格式为 $u_{i,j,k}^{n+1}=u_{i,j,k}^{n-1}+2r(u_{i+1,j,k}^{n}+u_{i-1,j,k}^{n}+u_{i,j+1,k}^{n}+u_{i,j-1,k}^{n}+u_{i,j,k+1}^{n}+u_{i,j,k-1}^{n}-6u_{i,j,k})$. 它是恒不稳定的, 计算结果也证明了这一结论. (2) 蛙跳格式是三层格式, 需先用其他方法计算第一层网格函数值, 为方便计, 算例中采用精确值计算.

从表 1 中还可得 3 点初步结论. (1) 差分蛙跳格式是恒不稳定的, 差分 FTCS 格式当 $r\leq 1/6$ 时是稳定的, 而 $r>1/6$ 时则不稳定. (2) 精细积分蛙跳格式的计算精度比相应的FTCS 格式高, 这与理论分析相一致. (3) 不同差分格式可用精细积分统一表达. 在式(6) 中, $e^{-\theta\tau}$ 不同近似式及式(5) 中积分项中被积函数的不同搭配表示, 将另文讨论.

## 参　考　文　献


1 Press W H, Teukolsky S A, Vetterling W T, et al. Numerical recipes[M]. 2nd ed. London: Cambridge Univ. Press, 1992. 75～105

2 李荣华, 冯果忱. 微分方程数值解法[M]. 北京: 人民教育出版社, 1979. 309～411

3 钟万勰. 计算结构力学与最优控制[M]. 大连: 大连理工大学出版社, 1993. 1～80

4 钟万勰. 子域精细积分与偏微分方程数值解[J]. 计算结构力学及其应用, 1995, 12(3): 253～260

5 钟万勰. 单点子域积分与差分[J]. 力学学报, 1996, 28(2): 159～162


# Meticulous Integration of One-Point Subdomain for Solving Three-Dimensional Diffusion Equation


Zeng Wenping

(Dept. of Manag. Info. Sci., Huaqiao Univ., 362011, Quanzhou)



**Abstract**　For solving three-dimensional diffusion equation, a meticulous integration of one-point subdomain is established. The superiority of this meticulous integration of one-point subdomain relative to difference method is shown by their stability analysis.



**Keywords**　difference method, meticulous integration of one-point subdomain, stability analysis, three-dimensional diffusion equation