



利用邊界內插之起始值加速數值演算之收斂速度

何正義

國立宜蘭大學機械工程學系（所）副教授

摘要

本研究乃在探討 Dirichlet 及 Biot 邊界等偏微問題之計算速率，並評估其起始值經一次邊界值內插及連續內插後所產生之加速收斂效益；同時對於易產生演算錯誤之疊代次數亦加以界定。經多次模擬分析與理論結果之進一步比對，發現一次邊界內插之起始值運用於 Dirichlet 問題(固定邊界值)時，得解所需時間僅為無內插加速所需時間的 1/2；至於針對 Neuman 問題(偏微邊界值)之演算，其計算時間亦可節省 10%。進一步地引用連續內插之加速運算，其計算時間更可大量節省約 75% (無固定邊界)；而連續內插的次數經由鬆弛係數之設定及有限級數展開之規範，其結果亦得到相當滿意之預測。經由研究之結果亦顯示最終的計算數值解將不受起始值猜測的影響。因此本研究之完成將可提供一種與理論解一致之簡單又快速之收斂方法；而運用於其他程式亦可獲至相當之經濟效益。

關鍵詞：連續內插加速、鬆弛係數、起始值

*通訊作者 E-mail : jeho@niu.edu.tw



Utilize Initial Value of Interoperating Boundary Value to Speed up the Numerical Convergence

Je-Ee Ho

Associate Professor, Department of Mechanical and Electro-Mechanical Engineering,
National Ilan University

ABSTRACT

2-D Laplace's equation with Dirichlet and Biot boundary conditions were discussed here. A new developed method of setting the initial values by interpolating boundary value continuously was performed in solving the partial governing equation. With it, computing time is found to be about 25% and 75% less than traditional iterative procedure needed for Dirichlet boundary problem and Neumann boundary considered. Coupling the relax coefficient & power series, we can predict the times of interpolation successfully and prove the initial values no effect in final solution. The easy and efficient method was presented here, we call it "Continuous interpolation acceleration of interpolating boundary values". Different numerical method involving it make us get the convergent solution faster and more economical, and we also found they are almost consistent in 2-D Laplace's equation with all different boundary condition while comparing with the final solution and exact solution.

Keywords : Continuous interpolated acceleration, Relaxed coefficient, Initial value

***Corresponding author E-mail: jeho@niu.edu.tw**

一、前言

偏微數值求解可遠溯於泰勒展開及有限差分技術將方程式化成聯立代數式，爾後 Patankar 將其歸納並整理成一套運用於計算流體力學之基礎理論 (Patankar and Spalding, 1970)。為了降低 round off errors 與 traction errors，利用高斯消去法將代數化之偏微式化成矩陣式 (Spalding, 1972; Steger, 1978)；其中網格的重新排列，雖然大大提升數值之精確性；惟對於計算速度仍無重大的突破；此乃歸咎於矩陣求解過程中列陣元素之轉置作業浪費了相當時間。Schneider 和 Zedan (1981) 引用隱性的 Gauss-Seidel 程序，以 SOR 疊代求出最佳解；惟計算過程的疊代次數太多而導致速度效應並不明顯。Schumann (1980) 以簡易之顯函數法將計算之矩陣分解成 $[L][U]$ 子矩陣模式，雖然計算時間大幅改善 (約一般 ADI 方式之 50% 時間)；然逆陣運算原理易發生數值發散之現象。邇來運用 Monte Carlo 模式及機率理論 (Hirano et al., 2002; Tzeng and Liu, 2005) 於流場領域的探索已逐步引起廣泛之討論及興趣，而對於取捨最佳鬆弛係數所耗費時間之經濟性是有待討論的。

偏微數值計算發展至今大家皆把注意焦點放在數值方法或演算程序之層面，例如網格更新及排列、疊代或距陣法之選取。惟方法的創新或調整皆需花費相當的時間整合及驗證，此將引起研究者相當之困擾。因此為了避免此種繁瑣的苦惱，本研究並針對起始值之適度修正而保持原有的數值方法；其中相關之偏微方程式先行以差分法化成代數式且計算的 Domain 分成 250×250 網格，再利用 686 CPU RAM 計算器的疊代運算，其結果發現不但計算程序更加穩定、大幅縮短演算時間且方法甚為容易。相信在擴充為三維微分方程式亦應可收到異曲同工之效果。

二、理論分析

2-1 理論公式解方程式推導

為簡化分析之複雜性，理論模式採線性之拉普拉斯偏微方程式(1), 相關之邊界條件如圖 1 所示

$$\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 X}{\partial y^2} = 0 \quad (1)$$

邊界條件

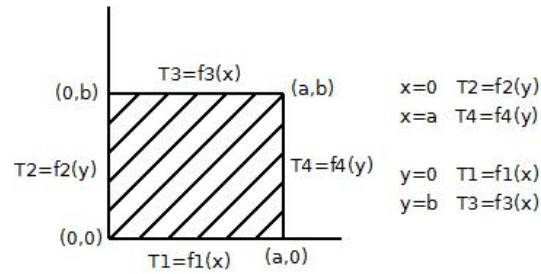


圖 1. 計算 domain 示意圖

經合成疊代法 其理論解可表述如下

$$T(x, y) = T_1(x, y) + T_2(x, y) + T_3(x, y) + T_4(x, y)$$

$$\left. \begin{aligned} T_1 &= f_1(x) & y &= 0 & 0 \leq x \leq a \\ T_2 &= f_2(y) & x &= 0 & 0 \leq y \leq b \\ T_3 &= f_3(x) & y &= b & 0 \leq x \leq a \\ T_4 &= f_4(y) & x &= a & 0 \leq y \leq b \end{aligned} \right\}$$

利用分離係數法及傅立葉積分技巧，滿足上述邊界條件之理論解可歸納成式

(2)~(5)

$$T_1(x, y) = \frac{2}{a} \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{1}{\sinh\left(\frac{n\pi b}{a}\right)} \int_0^a K_1 \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \right] \cdot \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) * \sinh\left[\frac{n\pi}{a}(b-y)\right] \quad (2)$$

$$T_2(x, y) = \frac{2}{b} \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{1}{\sinh\left(\frac{n\pi a}{b}\right)} \int_0^b K_2 \sin\left(\frac{n\pi y}{b}\right) dy \right] \cdot \sin\left(\frac{n\pi y}{b}\right) * \sinh\left[\frac{n\pi}{b}(a-x)\right] \quad (3)$$

$$T_3(x, y) = \frac{2}{a} \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{1}{\sinh\left(\frac{n\pi b}{a}\right)} \int_0^a K_3 \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \right] \cdot \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) * \sinh\left(\frac{n\pi y}{a}\right) \quad (4)$$

$$T_4(x, y) = \frac{2}{b} \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{1}{\sinh\left(\frac{n\pi a}{b}\right)} \int_0^b K_4 \sin\left(\frac{n\pi y}{b}\right) dy \right] \cdot \sin\left(\frac{n\pi y}{b}\right) * \sinh\left(\frac{n\pi x}{b}\right) \quad (5)$$

$$\Rightarrow T(x, y) = T_1(x, y) + T_2(x, y) + T_3(x, y) + T_4(x, y)$$

2-2 邊界內插之起始值理論分析

起始值內插數值之推導依圖 2 Dirichlet 邊界(邊界值為常數) 及圖 3 Biot 邊界問題(偏微邊界值) 分別討論

2-2-1 Dirichlet 固定邊界問題

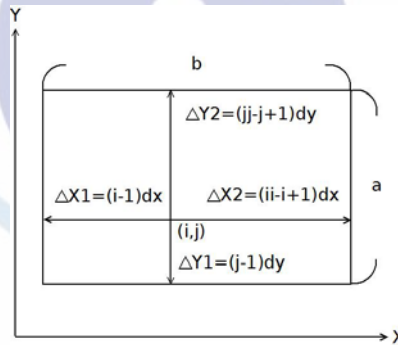


圖 2. Dirichlet 邊界

相關符號 $a, b, \Delta X_1, \Delta X_2, \Delta Y_1, \Delta Y_2$ 定義如下(如圖 2 所示), 其中 I, J 分別表示區內之欄數及列數; i, j 為計算點之座標

$$a = (I - 1)dx \quad b = (J - 1)dy$$

$$\Delta X_1 = (i - 1)dx \quad \Delta X_2 = (I - i)dx$$

$$\Delta Y_1 = (j - 1)dy \quad \Delta Y_2 = (J - j)dy$$

由於邊界值為固定常數, 因此計算區內之起始猜值依各點對應位置分別實施一次中央差分內差即可。

$$T_{ij} \times DD = f_2(y) + AA \times f_4(y) + BB \times f_1(x) + CC \times f_3(x)$$

$$T_{ij} = \frac{1}{DD} \times f_2(y) + \frac{AA}{DD} \times f_4(y) + \frac{BB}{DD} \times f_1(x) + \frac{CC}{DD} \times f_3(x)$$

$$\therefore T_{ij} = AT_{ij} + (1-A)T_{ij} \quad (6)$$

$$\text{其中 } AA = \frac{\Delta X_1}{\Delta X_2} \quad BB = \frac{a \Delta X_1}{b \Delta Y_1} \quad CC = \frac{a \Delta X_1}{b \Delta Y_2}$$

$$DD = 1 + AA + BB + CC$$

2-2-2 Biot 微分邊界問題

以 Biot 邊界問題探討為例，由於邊界值為微分或變數型態，因此內插起始值將需隨疊代之次數而變化。由圖 2 顯示，計算區域內之數值主要受邊界上方熱值 q 入射之影響，因此起始值於該方向之邊界內插將保持原來的物理特性。符號 a, b 重新定義於圖 3 所示，而 L 表邊界長度。

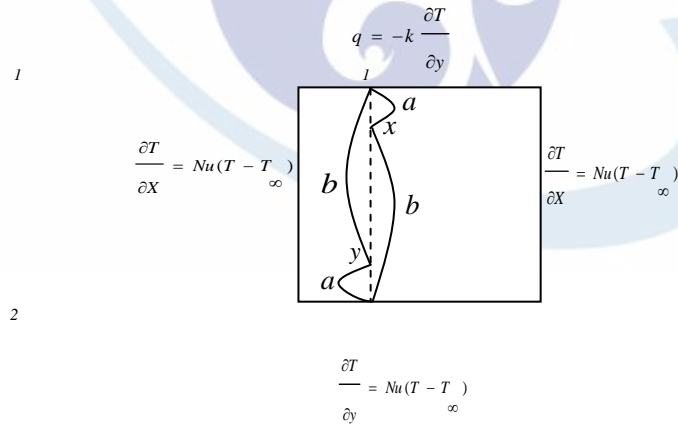


圖 3 Biot 偏微邊界值

圖 3 內部格點的估算值與邊界值之交互疊代可經由下列之 T_x, T_1 及 T_y, T_2 之內插運算，其中係數 A, B 為 Nu 值及外界常數之組合。

$$T_x = \frac{b}{L} T_1 + \frac{a}{L} T_i \quad T_1 = T_x + \frac{q \Delta y}{K}$$

$$T_y = \frac{a}{L} T_1 + \frac{b}{L} T_i \quad T_2 = AT_y + B$$

倘起始邊界值設為 Q ，經一次的遞迴演算邊界值可表成：

$$T_1 = \frac{b}{L} \left(Q + \frac{q\Delta y}{K} \right) + \frac{a}{L} (AQ + B) + \frac{q\Delta y}{K}$$

$$T_2 = A \left[\frac{a}{L} \left(Q + \frac{q\Delta y}{K} \right) + \frac{b}{L} (AQ + B) \right] + B$$

經 n 次計算後

$$T_1 \cong Q \left(\frac{b}{L} \right)^{n-1} \left(\left(\frac{b}{L} \right) + \left(\frac{a}{L} \right) (2A + A^2 + A^3) \right) +$$

$$\frac{q\Delta y}{K} \left[\frac{\left(1 - \left(\frac{b}{L} \right)^{n+1} \right)}{1 - \left(\frac{b}{L} \right)} + \frac{a}{L} \left(\frac{b}{L} \right)^{n-2} \cdot \frac{(1 - A^{n-1})}{1 - A} \right] +$$

$$O\left(\frac{b}{L}\right)^n \quad (7)$$

$$T_2 \cong Q \left(\frac{b}{L} \right)^{n-1} \left(\frac{a}{L} \right) \left[\frac{A(1 - A^n)}{1 - A} + A^n \left(\frac{b}{L} \right) \right] +$$

$$\frac{q\Delta y}{K} \left\{ \frac{a}{L} \left[\frac{\left(1 - \left(\frac{b}{L} \right)^n \right)}{1 - \left(\frac{b}{L} \right)} \times \frac{A(1 - A^{n-1})}{1 - A} \right] \right\} +$$

$$O\left(\frac{b}{L}\right)^n \quad (8)$$

2-2-3 疊代誤差推導

至於內部格點的起始猜測 Q 如何影響疊代計算的誤差，一套遞迴公式推導及符號說明分述如下：（ T_i^* ：格點之疊代值， T_i ：格點經 i 次邊界內插後之數值， Q ：格點

起始猜測值 ω ：鬆弛係數 0.5~1)

$$T_1^* = \omega T_1 + Q \quad T_2^* = \omega T_2 + (1-\omega)(\omega T + Q) = \omega T + \omega T(1-\omega) + Q(1-\omega)$$

$$T_3^* = \omega T_3 + (1-\omega)[\omega T + \omega T(1-\omega) + Q(1-\omega)] \quad T_4^* = \omega T_4 + (1-\omega)\omega T + (1-\omega)^2 \omega T + (1-\omega)^3 \omega T + Q(1-\omega)^3$$

$$\begin{aligned}
T_N^* &= \omega T_{N-1} \times \frac{1 \times [1 - (1 - \omega)^{N+1}]}{1 - (1 - \omega)} + Q(1 - \omega)^N \\
&= T[1 - (1 - \omega)^{N+1}] + Q(1 - \omega)^N
\end{aligned} \tag{9}$$

$$C = \frac{T_{N-1} - T_N}{T_{N-1}} = \frac{(1 - \omega)^N - (1 - \omega)^{N+1}}{1 - (1 - \omega)^{N+1}} \tag{10}$$

三、結果與討論

1. 由 (9) 式可知若鬆弛係數 $0.5 \leq A < 1$ 時，且當 N 值達一定後起始值效應 Q 即消失。亦即不管起始值 Q 給予多少，將不會影響最後之答案。若 $\omega = 0.5$ 則連續內插次數 $N = 10$ 次則 Q 值效應僅為原先之 $1/1024$ ，若 $N = 20$ 次則效應僅為原先之 1×10^{-6} 。連續內插產生之相對誤差值 C 取決於式(10)，亦即取決於 ω 及 N 值。例如 $\omega = 0.5$ 、 $N = 10$ 則 $C \cong 5 \times 10^{-4}$ ，若 $N = 20$ 則 $C \cong 5 \times 10^{-7}$ ；因此數值程式收斂之相對誤差須小於 C 值，否則程式計算將得到錯誤（即全由內插之結果）。非固定邊界連續起始值 Q 之效應除依式(10)決定外，亦受式(7)(8)中 $(b/L)^n$ 項限制。在本研究中設定 $b = 249$ 、 $L = 250$ ，當 $n = 1000$ 次時 Q 之效應為原先之 0.018 。若 $n = 2000$ 次則效應為原先之 3×10^{-4} ；當邊界值趨向穩定時，T1、T2 值僅為 $(q\Delta y / K)$ 、 (b/L) 、 $b(a/L)$ 等項之合成。故程式計算前可估算邊界之溫度值，以減少執行之時間。

2. 比較理論與內插模式計算之結果，以 Dirichlet 問題為範例且其四周邊界值分別設為 1, 1, 2, 2。由圖 4 及圖 5 結果的分析顯示，數值解與理論解的分布是相當一致地；而出現於理論結果圖（如圖 4）邊界上之異常溫度分佈，此乃理論解由傅立葉級數 $1 \sim \infty$ 項合成而實際計算僅取 $1 \sim 200$ 項所致，惟其並不影響整體之結果。

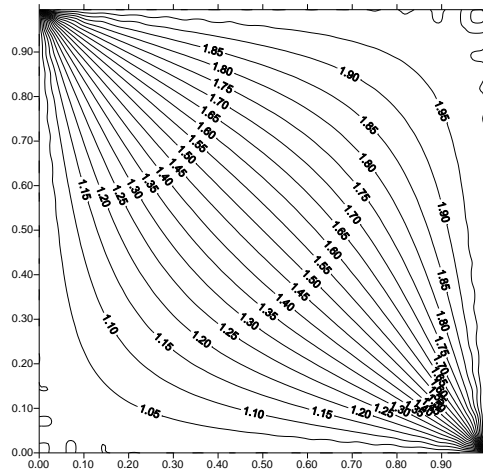


圖 4. 理論分布圖

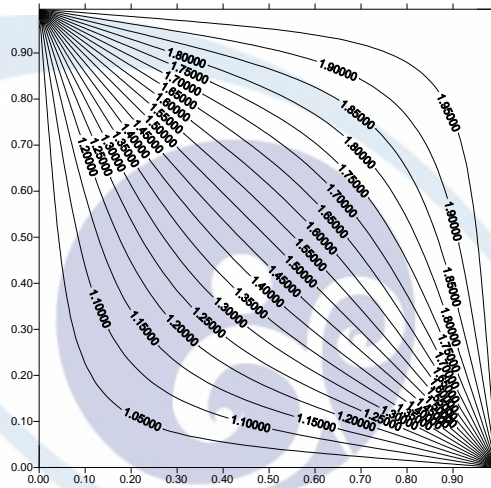


圖 5. 數值計算結果圖

3.由圖 6 至圖 10 針對加速與未加速的討論，此乃指內部格點之數值是否經邊界內插計算之 cpu 耗時的效益。圖 6 曲線顯示 Dirichlet 問題(同上之邊界條件)於不同之相對誤差條件下之完成收斂時間。其中無加速作用之收斂計算時間由相對誤差 $C = 5 \times 10^{-5}$ 的 41.96 秒快速增至 $C = 2 \times 10^{-7}$ 的 137.27 秒。而一次內插加速僅由 $C = 5 \times 10^{-5}$ 的 3.98 秒緩慢增至 $C = 2 \times 10^{-7}$ 的 44.86 秒。由此數據顯示隨著相對誤差的減小，計算時間將增多；同時具加速作用的計算時間明顯地大幅降低。

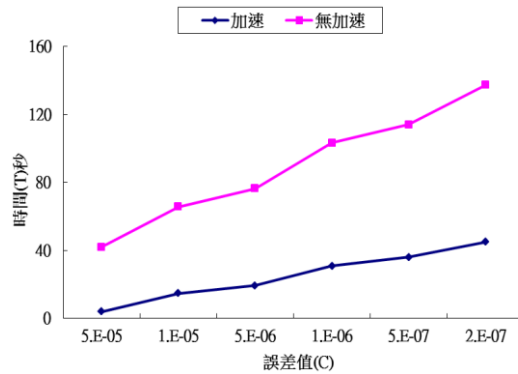


圖 6. Dirichlet 問題之收斂誤差值與收斂時間關係圖

4.圖 7 分析 Dirichlet 問題(同上的邊界條件)於不同起始值設定下完成收斂之 cpu 所需時間。理論上起始值越接近邊界範圍或在邊界內易達收斂效果；反之，初始設定偏離邊界範圍值愈遠，其所花的時間愈長。當討論起始值-3~2.5 之變化區間，於無加速計算條件下完成收斂約需 155 秒~125 秒；而當起始值給予 1.5 時(落於邊界條件範圍內) 其計算時間僅需 45 秒；由此可知起始設定之重要性。另考慮內插加速後之趨勢分析，無論起始值給定多少，其計算時間約需 40~45 秒而其需時間平均少約 70%；此亦暗示起始值猜測值並不會影響內插加速法的效應而其疊代效益是相當明顯的。

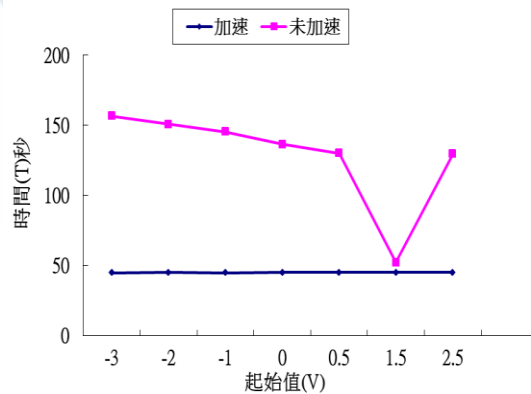


圖 7. Dirichlet 問題之起始值設定與收斂時間關係圖 (C=2E-7)

5.圖 8 探討 Biot 邊界問題(NU=100 、連續內插 N=104 次)之起始運算、與未內插加速之收斂時間關係。當 V=-200 時連續加速 (約 172 秒) 比未加速 (約 414 秒) 節省 58.4% 的時間；而 V=200 時，連續加速 (約 172 秒) 亦比未加速(約 412 秒) 節省 57.9% 的時間；而 V 字形曲線之最低點即為最佳之起始數值範圍，此結果亦吻合討論四之分

析。針對 Biot 邊界問題而言，無論使用或未使用內插加速計所需時間略高於 Dirichlet 邊界問題(比對圖 7)，此乃 Biot 之邊界值為時間變化之函數而需較多的疊代次數所致。

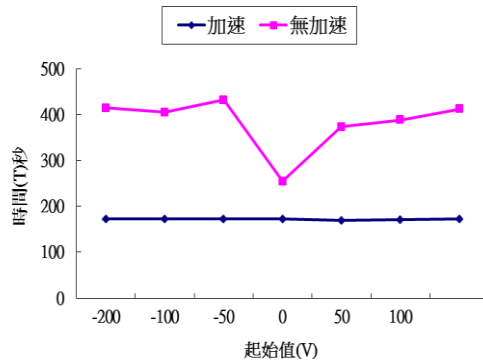


圖 8. Biot 邊界之起始值與計算時間關係圖 (NU=100、N=104、C=2E-7)

6.承討論五，圖 9 顯示當 NU=1、V=-200 時 連續內插 N=104 次(約需 420 秒)比未內插 (約 1670 秒) 節省 77.18%的時間。另一方面若設定 V=200 時，連續加速 (約 420 秒) 比未加速 (約 1645 秒) 亦節省 77.4%的時間；於此內插技術已展現其計算優勢。進一步比較圖 8 與圖 9 之差異，由於較小之 NU 值暗示邊界之變化較緩慢，換句話說不易達到穩定狀態；因此對於圖 9 中(較小之 NU 值) cpu 耗費較長時距之結果並不感到意外。

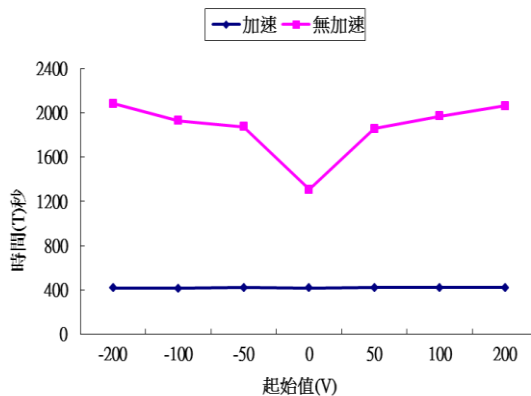


圖 9. Biot 邊界之起始值與計算時間關係圖 (NU=1、N=104、C=2E-7)

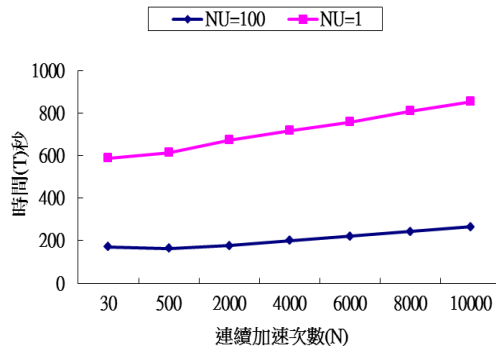


圖 10. Biot 邊界之連續內差次數 N 與時間關係圖 ($C=2E-7$)

7.最後我們將討論內插次數 N 與收斂時間之關係，於圖 10 中顯示 $NU=1$ 、 $N=500$ 之條件下收斂時間約需 610 秒，將 NU 增至 100 時獲致數值解僅需 164 秒；另一方面當 $N=8000$ ， $NU=1$ 時約需 860 秒收斂時間，而約 244 秒即達成 $NU=100$ 之計算。 NU 值效益已於討論六中獲致合理地解釋，至於內插次數 N 的過度增加則易造成數值解偏離統御方程式的架構；換句話說僅受邊界值之影響，此將導致錯誤的數值解而延長收斂的計算時間。由圖 10 中亦可推測 NU 與 N 的微妙關係，經計算數據呈現 NU 與 N 兩者是相反趨勢的；換句話說，為了達到較好的加速計算效果 N 值就必須選取愈大(當 NU 愈小時)，反之當 NU 愈大時 N 值就必須取愈小。此亦可根據式(7)、(8)的推導得到印證。

四、結論

1. 由 Dirichlet (固定邊界)及 Biot (無固定邊界)之測試結果顯示，具內差效應之數值收斂時間將大量減少。固定邊界問題使用內插技數將順利地簡化了加速條件的複雜性，而非固定邊界問題則依 NU ， N ， V 值的變化而有不同之效果。

2.加速次數之預估可依

(1)固定邊界：

$$X_N = X \left[1 - (1-\omega)^{N+1} \right] + Q(1-\omega)^N$$

$$C = \frac{X - X_N}{X} = \frac{(1-\omega)^N - (1-\omega)^{N+1}}{1 - (1-\omega)^{N+1}}$$

判斷連續內插次數 (N) 與誤差 (C) 的關係，進而由誤差 (C) 來決定連續內插次數 (N)。

(2)無固定邊界：

由式 (7) 式 (8) 預估邊界值的內插次數 N 值主要取捨於 b/L (網格點的數目)及 NU 項。

3.傳統的無加速計算，適當起始值 (邊界內) 的選取易達收斂效率；實際上預先的推測是十分困難。若引用“內插加速法，即使起始值取於邊界內或邊界外，在經由一次內插效果，其值都會在邊界範圍內而增加了收斂之速度；而無論起始猜測值多少，最後其效應皆會消失(亦即最後結果不受該值影響)。

4.邊界偏微方程式之係數愈小(NU 值較小)其內插收斂之加速效果較差，而較大 NU 值 其加速效率較明顯。

5.達收斂要求之相對誤差較小者需較多之疊代次數，即達到穩定之計算時間較長；惟得到之數值解亦較為精確。

上述之討論及結論亦可適用於至其他偏微型式之邊界如 Neumann 問題。

參考文獻

- Hirano, H., Seo, M., Ozoe H., 2002, "Two-dimensional numerical computation for Rayleigh-Benard Convection with booth the Navier-Stokes Equation and the Boltzmann Equation," *Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol. 10, pp.765–780. .
- Patankar, S.V., Spalding, D.B., *Heat, Mass Transfer in Boundary Layers*, 2nd ed., Intertext Books, Inc., London, 1970.
- Tzeng, P.Y., Liu, M.H., 2005, "Direct simulation Monte Carlo Modeling on two-dimensional Raleigh-Benard Instabilities of Rarefield Gas," *Numerical Heat Transfer A*, Vol. 47, pp. 805–823.

Schneider, G.E., Zedan, M.A., 1981, "Modified strongly implicit procedure for the numerical solution of field problems," *Journal of numerical heat transfer*, Vol. 4, pp. 1–19.

Schumann, U., *Fast Elliptic Solvers and their Application in Fluid Dynamics, Computational Fluid Dynamics*, Hemisphere, Washington, D.C, 1980.

Spalding, D.B., 1972, "A novel finite-difference formulation for differential expressions involving both first and second derivatives," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 4, pp. 551-559.

Steger, J.L., 1978, "Coefficient matrices for implicit finite difference solution of the Inviscid Fluid Conservation Law Equations," *Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 13, pp. 175-188.

