分块五对角矩阵：二维热传导方程数值离散结构解析

数值传热学分析

2025 年 6 月 17 日

1 引言

在二维热传导方程的数值求解中，隐式向后差分格式会产生特定的矩阵结构。本文深入分析这种结构如何从五对角矩阵演化为分块五对角矩阵，揭示其数学本质及物理意义。

2 五对角矩阵基本结构

考虑 $N_x \times N_y$ 网格系统，其线性系统矩阵为五对角形式：

$$A = \begin{pmatrix} d_0 & e_0 & f_0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ c_1 & d_1 & e_1 & f_1 & \ddots & & \vdots \\ b_2 & c_2 & d_2 & e_2 & f_2 & \ddots & \vdots \\ 0 & b_3 & c_3 & d_3 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & e_{n-2} & f_{n-2} \\ \vdots & & \ddots & b_{n-1} & c_{n-1} & d_{n-1} & e_{n-1} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & b_n & c_n & d_n \end{pmatrix}$$

其中非零元素出现在主对角线和其相邻的四个对角线上。

3 二维热传导问题离散方程

二维热传导方程隐式离散格式：

$$-r_x T_{i-1,j}^{n+1} - r_y T_{i,j-1}^{n+1} + (1 + 2r_x + 2r_y) T_{i,j}^{n+1} - r_x T_{i+1,j}^{n+1} - r_y T_{i,j+1}^{n+1} = T_{i,j}^n \tag{1}$$

其中 $r_x = \frac{\alpha \Delta t}{(\Delta x)^2}$, $r_y = \frac{\alpha \Delta t}{(\Delta y)^2}$。

4 分块矩阵结构推导

4.1 节点排序方法

采用行优先 (lexicographical) 排序：

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} T_{0,0} & T_{0,1} & \cdots & T_{0,N_y-1} & T_{1,0} & \cdots & T_{N_x-1,N_y-1} \end{pmatrix}^T$$

索引映射：$k(i,j) = i \cdot N_y + j$

4.2 矩阵元素分析

表 1: 矩阵元素与物理意义对应关系

类型	矩阵位置	物理耦合
自耦合	$A_{k,k} = 1 + 2r_x + 2r_y$	节点自身
行内左邻	$A_{k,k-1} = -r_y$	$T_{i,j} \leftrightarrow T_{i,j-1}$
行内右邻	$A_{k,k+1} = -r_y$	$T_{i,j} \leftrightarrow T_{i,j+1}$
上行同列	$A_{k,k-N_y} = -r_x$	$T_{i,j} \leftrightarrow T_{i-1,j}$
下行同列	$A_{k,k+N_y} = -r_x$	$T_{i,j} \leftrightarrow T_{i+1,j}$

4.3 分块矩阵形成

将矩阵划分为 $N_x \times N_x$ 个块，每个块大小为 $N_y \times N_y$：

$$A = \begin{pmatrix} B_0 & C_0 & 0 & \cdots & 0 \\ A_1 & B_1 & C_1 & \ddots & \vdots \\ 0 & A_2 & B_2 & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & C_{N_x-2} \\ 0 & \cdots & 0 & A_{N_x-1} & B_{N_x-1} \end{pmatrix}$$

4.3.1 对角块 B_i 结构

B_i 描述第 i 行内的耦合关系，为三对角矩阵：

$$B_i = \begin{pmatrix} 1+2r_x+2r_y & -r_y & 0 & \cdots & 0 \\ -r_y & 1+2r_x+2r_y & -r_y & \ddots & \vdots \\ 0 & -r_y & 1+2r_x+2r_y & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -r_y \\ 0 & \cdots & 0 & -r_y & 1+2r_x+2r_y \end{pmatrix}$$

4.3.2 次对角块 A_i 结构

A_i 描述与上一行 $(i-1)$ 的耦合，为对角矩阵：

$$A_i = \begin{pmatrix} -r_x & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -r_x & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & -r_x \end{pmatrix}$$

4.3.3 上次对角块 C_i 结构

C_i 描述与下一行 $(i+1)$ 的耦合，也为对角矩阵：

$$C_i = \begin{pmatrix} -r_x & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -r_x & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & -r_x \end{pmatrix}$$

5 矩阵性质分析

5.1 对角占优性

对角块 B_i 严格对角占优：

$$|B_i[j,j]| = |1 + 2r_x + 2r_y| > 2r_x + 2r_y = \sum_{k \neq j} |B_i[j,k]| + |A_i[j,j]| + |C_i[j,j]|$$

5.2 稀疏性分析

非零元素比例：

$$\frac{\text{非零元素数}}{\text{总元素数}} = \frac{5N_x N_y}{(N_x N_y)^2} = \frac{5}{N_x N_y}$$

例如当 $N_x = N_y = 100$ 时，非零元素占比仅 0.05%。

6 边界条件处理

6.1 第二类边界条件离散

以左边界 $(i = 0)$ 为例：

$$-k \frac{\partial T}{\partial x}\bigg|_{x=0} \approx -k \frac{-3T_{0,j} + 4T_{1,j} - T_{2,j}}{2\Delta x} = q_{\text{left}}$$

6.2 角点处理

左下角 $(i = 0, j = 0)$ 采用混合近似：

$$\begin{cases} -k \frac{-3T_{0,0}+4T_{1,0}-T_{2,0}}{2\Delta x} = q_x \\ -k \frac{-3T_{0,0}+4T_{0,1}-T_{0,2}}{2\Delta y} = q_y \end{cases}$$

7 分块矩阵求解优势

7.1 存储优化

传统存储：$O((N_x N_y)^2)$
分块存储：$O(5N_x N_y)$

7.2 求解算法

块三对角系统求解算法：

$$
\begin{aligned}
&\text{// 前向消去}\\
&\text{for } i = 1 \text{ to } N_x - 1\\
&\quad B_i := B_i - A_i \cdot B_{i-1}^{-1} \cdot C_{i-1}\\
&\quad \mathbf{b}_i := \mathbf{b}_i - A_i \cdot B_{i-1}^{-1} \cdot \mathbf{b}_{i-1}\\
\\
&\text{// 回代}\\
&\mathbf{T}_{N_x-1} = B_{N_x-1}^{-1} \mathbf{b}_{N_x-1}\\
&\text{for } i = N_x - 2 \text{ downto } 0\\
&\quad \mathbf{T}_i = B_i^{-1}(\mathbf{b}_i - C_i \mathbf{T}_{i+1})
\end{aligned}
$$

8 结论

本文证明二维热传导方程隐式离散：

- 自然形成分块五对角矩阵结构
- 分块结构是物理耦合关系的数学表征
- 提供高效存储和求解框架
- 为大型问题求解提供理论基础

分块结构不是人为选择，而是热传导物理特性在数值离散中的必然呈现。