

抛物型方程定解问题的 有限差分数值计算

● 张锁春 编著



科学出版社
www.sciencep.com

抛物型方程定解问题的 有限差分数值计算

张锁春 编著

科学出版社

北 京

内 容 简 介

为了适应“计算物理→科学与工程计算→高性能计算”发展的需要,本书专门为在计算机(尤其是超高速大型计算机)上大规模数值求解抛物型方程各种类型的适定问题而写.本书将在解决实际问题计算过程中可能涉及到的各类问题尽可能地加以叙述,但主要是围绕典型方程所采用的有限差分方法的格式和技巧展开的.力求简明扼要,通俗易懂,学了能用.

本书共分 10 章,包括:抛物型方程定解问题的提出、有限差分方法的基础知识、求稳定性条件的方法、抛物型方程的差分格式、非线性抛物型方程、高于二阶的抛物型方程和抛物型方程组、退化抛物型方程、抛物型方程有限差分的并行计算、数值计算中的若干问题以及数值计算的实际应用之例.

本书可作为从事与抛物型方程相关的广大科技工作者的使用手册和高等院校的大学生和研究生学习“偏微分方程数值解”课程的参考书以及从事专业研究工作的参考资料.

图书在版编目(CIP)数据

抛物型方程定解问题的有限差分数值计算/张锁春编著. —北京:科学出版社, 2010

ISBN 978-7-03-026312-4

I. 抛… II. 张… III. 抛物型方程-差分法-数值计算 IV. O175.26

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2009)第 242893 号

责任编辑:陈玉琢 房 阳/责任校对:陈玉凤

责任印制:钱玉芬/封面设计:王 浩

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

中国科学院印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2010 年 1 月第 一 版 开本: B5(720 × 1000)

2010 年 1 月第一次印刷 印张: 16 3/4

印数: 1—2 500 字数: 323 000

定价: 50.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

前言：计算学是科技进步的重要推动力量

—— 浅谈计算物理和高性能计算学

计算物理 (CP) 是以计算机为工具, 应用数学的方法解决物理问题的一门应用性学科, 是物理、数学和计算机三者结合的交叉性学科. 它产生于第二次世界大战期间美国对核武器的研制, 伴随着计算机的发展而发展.

CP 的目的不仅仅是计算, 而是要通过计算来解释和发现新的物理规律. 这一点它与传统的实验物理和理论物理并无差别, 所不同的只是在于使用的工具和方法上. 计算物理早已与实验物理和理论物理形成三足鼎立之势, 甚至有人提出它将成为现代物理大厦的“栋梁”.

第二次世界大战之后, 由于计算机的突飞猛进, 快速发展, 大大增强了人们从事科学研究的能力, 促进了不同学科之间的交叉渗透, 缩短了基础研究到应用开发的过程, 加速了把科学技术转化为生产力的进程. 计算物理的方法和技巧也迅速地从核物理向其他学科渗透, 从军工系统向民用系统转移, 大大丰富了计算科学内容. 从 20 世纪 80 年代起, 人们常常使用“科学与工程计算”一词, 似乎比“计算物理”更名副其实. 进入 90 年代, 需要用计算机来计算或模拟的问题越来越大且越复杂, 使用的计算机越来越快. 高性能计算已成为促进现代科技发展一个必不可少的重要手段.

本文是以近 50 年来在美国发生的事实, 论述从计算物理学到高性能计算学的演变过程.

(一) 计算物理的形成和发展

现在人们已经知道美国研制原子弹是从 1942 年 6 月 17 日罗斯福总统批准“制造核武器计划”的报告算起, 8 月 13 日正式启动代号为“曼哈顿工程”的计划, 直到 1945 年 8 月 9 日将制造出来的三颗原子弹中的最后一颗投在日本长崎为止, 历时 3 年, 投入人力 15 万, 耗资 20 亿美元. 在研制过程中科学家们遇到许多不清楚的问题, 都需要通过计算来解决. 当时主要依靠手摇计算机和哈佛大学一台可用的“马克”计算机. 这台每秒只能进行三次加法运算的计算机却在美国的原子弹攻关中立了大功. 例如, 原子弹研制中的临界质量、聚合爆轰、中子链式反应、金属压缩性能等物理规律的摸清都是依靠计算机的计算, 利用数字近似来研究客观现实的方法, 这就创建了一门新的学科——计算物理学.

冯·诺伊曼参加世界上第一台电子管的计算机“埃尼阿克”的研制工作. 后来

他回到普林斯顿高级研究所专门从事“曼尼阿克”计算机的研制,并用这台计算机有力地支持美国氢弹的研制攻关.大家知道,美国氢弹的研究是从1950年1月31日杜鲁门总统下令研制算起,到1952年10月31日进行代号为“麦克”(Mike)的热核试验为止,用了2年零9个月时间,它要求准确地求出与热核爆炸有关的一切,确定一个非常复杂的问题.这关系到瞬时内发生的最复杂的物理过程,要计算出来必须要有快速计算机.由此可见,氢弹的研制也有力地促进了计算机和计算物理的共同发展.但正式公开出现“计算物理”一词是从1963年起陆续出版的“计算物理方法”丛书中出现的.

核武器研制的需要大大刺激计算机的发展,据了解,1950年全世界才有15台计算机,到了1962年仅在美国就超过16000台计算机.本来计算机和计算物理犹如一对孪生兄弟,在核武器研制中相互促进、相互影响、共同发展.但是到了60年代中期由于硅平面工艺的出现,集成电路成为独立的工艺领域,可借助于计算机本身的力量精益求精.硅的集成度平均3年增加4倍,而计算机每3年更新1次.但是到了60年代中期开始推出小型计算机,70年代末推出个人计算机,80年代中期又推出高档超级微机.而计算物理发展所需要的大型计算机得不到发展,计算机工业的短期市场效益严重地冲击科学研究的长期利益.1981年以哈佛大学普雷斯为首的11位著名科学家联名上书,向美国国家基金会(NSF)呈送“发展计算物理的建议书”,大声疾呼计算机物理正处于一个危机阶段.为了给计算物理带来所需要的存储容量和计算能力,他们提出建立国家范围内的网络计算系统.

(二) 科学计算的蓬勃发展

1983年一个以美国著名数学家拉克斯为首的包括不同学科的专家委员会,向美国政府提出报告,强调科学计算是关系到国家安全、经济发展和科技进步的关键性的环节,是关系到国家命运的大事.此报告引起美国朝野的广泛支持,于是美国政府迅速采取了措施,于1984年美国大幅度地增加对科学计算的经费支持.其中为了发挥超级计算机在基础研究中的作用,NSF不仅建立了“先进科学计算办公室”,制定全面高级科学计算发展规划,而且连续5年累计拨款2.5亿美元新建成五个国家级超级计算中心,并配备当时最高性能的计算机;同时,还建成一个NSFnet新网络,通过工作站联结所属的5个民用超级计算中心,并和地区性网络形成一个全国性网络系统.

1990年由美国国家研究会提交的《振兴美国教学:90年代的计划》,主要建议资助金额应该增加到每年2.5亿美元,因为这种数学将成为有效地使用已在运转的或已设计好的许多超级计算机所必需的工具.计算机为数学提供了一条通往科学和工程技术各领域的重要通道.为此美国政府增加对计算数学研究的拨款:NSF从1982~1987年间其金额已由400万美元增加到1200万美元;国防高级研究规划局仅在1987年就资助计算数学达100万美元;而空军科学研究局和能源部这个领

域内的预算也已增加了 1 倍; 陆军研究局则增加了 50%.

(三) 高性能计算的形成和发展

1991 年以美国总统倡议的名义提出了“高性能计算与通信 (HPCC)”计划, 这是为了保持和提高美国在计算和网络的所有先进领域中的领导地位而制定倡议的. 它要求到 1996 年高性能计算能力提高 1000 倍, 达到每秒万亿次浮点运算速度 (10^{12} 亿个操作/秒), 计算机网络通讯能力提高 100 倍, 达到每秒 10^9 位. HPCC 计划称为“巨大挑战”计划, 美国许多有名的大学与国家计算中心都投入大量的人力物力去攻克各种“挑战”项目.

1995 年 8 月 11 日美国克林顿总统宣布: 美国决定谋求真正的“零当量”全面禁止试验核武器条约, 同时宣布实施“加速战略计算创新 (ASCI) 计划, 这是为了确保美国核武器的性能、安全性、可靠性和更新需要. 这也是一个更巨大的挑战, 不亚于当年制造首批原子弹“曼哈顿工程”计划. 它主要依赖于先进的数值计算和模拟能力, 为此要求应用程序必须达到高分辨、三维、全物理和全系统的水平. 这种水平的模拟需要进行高性能的计算, 其性能要求在 2003 年至 2004 年计算机速度在 100 万亿次 (10^{14} OPS/s). “ASCI 计划”已从总统宣布之日执行.

说来很有趣, 50 年前美国为了制造原子弹, 实施了曼哈顿计划, 推动计算机的发展, 诞生了计算物理学, 整整影响了半个世纪. 如今美国为了库存核武器, 实施了 ASCI 计划, 又大大刺激了超级计算机和高性能计算学的发展, 是否又要影响下个世纪的前 50 年呢? 只能拭目以待!

(此文曾发表于《中国科学报》1997 年 8 月 4 日)

目 录

前言：计算学是科技进步的重要推动力量 —— 浅谈计算物理和高性能计算学

第一章 定解问题的提出	1
1.1 引言	1
1.2 方程的建立	1
1.3 定解条件	3
1.4 抛物型方程的特征	5
1.5 方程举例	8
第二章 有限差分方法的基础知识	11
2.1 引言	11
2.2 差分方程的形成	12
2.2.1 离散化及由此产生的问题	12
2.2.2 离散化的主要途径	12
2.3 差分方程的基本要求	19
2.3.1 局部截断误差和相容性	20
2.3.2 离散误差和收敛性	22
2.3.3 舍入误差和稳定性	24
2.3.4 线性差分方程的 Lax 等价定理	26
2.3.5 其他一些概念	28
第三章 求稳定性条件的方法	34
3.1 引言	34
3.2 ε 图解法	37
3.3 矩阵方法 (直接方法)	39
3.4 Fourier 级数法 (von Neumann 条件)	49
3.5 Routh-Hurwitz 判别法	54
3.6 最大值原理	55
3.7 能量估计法 (能量不等式方法)	56
3.8 启发式稳定性分析 —— 内插原则	59
3.9 Hirt 启发性方法	62
第四章 抛物型方程的差分格式	64
4.1 定义与记号	64

4.2 一维空间的抛物型方程	66
4.2.1 精确的差分公式推导	66
4.2.2 两层差分公式	68
4.2.3 三层差分公式	74
4.2.4 跳点法 (Hopscotch Methods)	84
4.2.5 “显-隐”格式和“隐-显”格式	85
4.2.6 半显式格式 (Saul'yev 非对称格式)	86
4.2.7 分组显式 (GE) 格式	88
4.2.8 Box 格式	89
4.3 多维空间的抛物型方程	90
4.3.1 一维格式的自然推广	90
4.3.2 交替方向隐式法 (ADI)	92
4.3.3 局部一维法 (LOD)	95
4.3.4 分裂法	99
4.3.5 三角分裂法 (TS)	101
第五章 非线性抛物型方程	103
5.1 一般情形	103
5.2 特例	106
5.3 线性化方法	107
5.3.1 Newton 线性化法	108
5.3.2 Richtmyer 线性化法	110
5.3.3 三层方法	112
5.4 一类非线性抛物型方程差分迭代分析	112
5.4.1 简单迭代格式 (Jacobi)	112
5.4.2 “追赶”迭代格式	113
5.4.3 超松弛迭代公式 (S.O.R)	114
第六章 高于二阶的抛物型方程和抛物型方程组	115
6.1 一维的四阶抛物型方程	115
6.1.1 直接法	116
6.1.2 Richtmyer 法	119
6.2 双抛物型方程	121
6.3 一维抛物型方程组	121
6.3.1 一种绝对稳定的经济格式 (Crank-Nicolson 格式)	122
6.3.2 高精度的交替计算格式	123
6.3.3 多层差分格式	124

6.4	非线性抛物型方程组的差分格式	124
6.5	耦合型方程组的差分格式	128
6.5.1	可压缩的 Navier-Stokes 方程组	128
6.5.2	不可压缩的 Navier-Stokes 方程组	131
6.5.3	定态平面流动的 Navier-Stokes 方程组	133
第七章	退化抛物型方程	136
7.1	线性退化抛物型方程的差分格式	136
7.1.1	一维问题	136
7.1.2	二维问题	138
7.2	Schrödinger 型方程的差分方法	140
7.2.1	线性情形	140
7.2.2	非线性情形	145
7.2.3	Zakharov 方程	146
7.3	渗流方程的差分方法	147
7.3.1	一维模型方程	148
7.3.2	渗流运动方程	148
7.4	对流扩散方程差分方法	158
7.4.1	中心显式格式	158
7.4.2	修正中心显式格式	159
7.4.3	迎风差分格式	160
7.4.4	Samarskii 格式	162
7.4.5	指数型差分格式	163
7.4.6	隐式格式	166
第八章	抛物型方程有限差分的并行计算	167
8.1	引言	167
8.2	分组显式 (GE) 方法	168
8.2.1	交替分组显式 (AGE) 方法	170
8.2.2	交替三点组显式 (AGE-3) 方法	171
8.3	显-隐交替方法	174
8.3.1	交替分段显-隐式 (ASE-I) 方法	174
8.3.2	交替分段 Crank-Nicolson 方法	178
8.4	二维问题的并行计算方法	182
8.4.1	引言	182
8.4.2	AGE 方法	183
8.4.3	ABE-I 方法	190

8.4.4	块 ADI 方法	191
8.4.5	交替差分块方法及其差分图	195
第九章	数值计算中的若干问题	200
9.1	线性代数方程组的数值计算	200
9.2	边界条件的处理	208
9.2.1	一维情形	208
9.2.2	二维情形	210
9.2.3	经济格式中的边界条件的处理	214
9.3	抛物型方程在球柱坐标下的问题	216
9.4	不等距网格	222
9.5	变系数和间断系数的问题	224
第十章	数值计算的实际应用之例	228
10.1	反应扩散方程之例 —— 生物化学中的布鲁塞尔振子的数值计算	228
10.1.1	布鲁塞尔振子 (Brusselator)	228
10.1.2	无扩散情形	229
10.1.3	带有扩散项情形	230
10.2	抛物与双曲耦合方程组之例 —— 二维辐射流体力学方程组的数值 计算	232
10.2.1	辐射流体力学方程组	232
10.2.2	差分格式	235
10.2.3	其它轴对称形式和数值例子	240
10.3	饱和与非饱和渗流之例 —— 黄河土石堤坝的数值计算	242
10.3.1	二维非矩形网格的差分方法	242
10.3.2	计算实例	250
参考文献		254
后记		256

第一章 定解问题的提出

1.1 引言

在冯康教授提出的“有限元方法”奠基性一文^[1]中,一开始就指出:“数理方程定解问题从原始形成到在计算机上进行数值解的过程大致有四个环节:

1. 物理机理:如各种物理量的守恒规律、运动规律等,也包括具体的条件,如参数、几何形状和其他原始资料.

2. 数学提法:通常表为连续形式的微分(积分)方程和相应的定解条件.

3. 离散模型:通常表为离散形式的代数方程,如差分方程.

4. 算法程序:即离散方程求解的算术步骤.不妨称阶段 $1 \rightarrow 2$,为数学化或解析化; $2 \rightarrow 3$,为离散化或代数化; $3 \rightarrow 4$,为算法化或算术化.”

假若由 $1 \rightarrow 3$,这就是秦元勋教授提出的“天然差分”的思想.

这四个环节加上“结果分析”这一环节,就组成了“计算物理学”的全部过程.由物理现象归结为数学模型,即 $1 \rightarrow 2$ 阶段,这是物理学家的事.这些数理方程的解析求解问题是属于数学物理方程研究的范围.本书只限于研究与数值计算有关的问题,即 $2 \rightarrow 3$ 阶段.

为了下面讨论方便起见,对微分方程的建立和定解条件等问题简单地加以叙述.

1.2 方程的建立

在研究热的传导或辐射热传导过程,气体扩散过程以及电磁场的传播等问题时,常归结为抛物型方程.在统计物理、概率论、量子力学、生物化学等问题时也会遇到这种类型的问题,在声热同时传播、弹性振动、水文地质、石油开采等问题时也涉及这一类型的方程.我们的研究主要限于这类方程中最简单的典型方程——热传导方程.

方程导出的步骤为:确定要研究的物理量,从所研究的系统中划出一个小部分,根据物理规律分析邻近部分和这个小部分的相互作用(抓住主要的作用,略去不重要的因素),这种相互作用在一个短时间内对物理量的影响用算式表达出来,经过简化整理就得到所需要的数学物理方程.

以热传导方程的导出为例说明之^[2].

考察物体 G 的热传导问题. 以函数 $u(x, y, z, t)$ 表示物体 G 在位置 (x, y, z) 处及时刻 t 的温度.

依据热传导中的 Fourier(傅里叶) 实验定律: 物体在无穷小时段 dt 内流过一个无穷小面积 dS 的热量 dQ 与物体温度沿曲面 dS 法线方向的方向导数 $\frac{\partial u}{\partial n}$ 成正比, 即

$$dQ = -k(x, y, z) \frac{\partial u}{\partial n} dS dt, \quad (1.2.1)$$

其中 $k(x, y, z)$ 称为物体在点 (x, y, z) 处的热传导系数, 它应取正值. 负号的出现是因为热量的流向和温度梯度的正向 (即 $\text{grad } u$ 的方向) 相反.

在物体 G 内任取一闭曲面 Γ , 它所包围的区域记为 Ω , 则从时刻 t_1 到 t_2 流进闭曲面的全部热量为

$$Q = \int_{t_1}^{t_2} \left\{ \iint_{\Gamma} k(x, y, z) \frac{\partial u}{\partial n} dS \right\} dt, \quad (1.2.2)$$

这里 $\frac{\partial u}{\partial n}$ 表示 u 对曲面的外法向导数.

流入的热量使物体内部温度发生变化. 在时间间隔 (t_1, t_2) 中物体温度从 $u(x, y, z, t_1)$ 变化到 $u(x, y, z, t_2)$, 它所应该吸收的热量是

$$\iiint_{\Omega} c(x, y, z) \rho(x, y, z) [u(x, y, z, t_2) - u(x, y, z, t_1)] dx dy dz,$$

其中 c 为比热, ρ 为密度. 因此就成立

$$\int_{t_1}^{t_2} \iint_{\Gamma} k \frac{\partial u}{\partial n} dS dt = \iiint_{\Omega} c \rho [u(x, y, z, t_2) - u(x, y, z, t_1)] dx dy dz.$$

今假设函数 u 关于变量 x, y, z 具有二阶连续偏导数, 关于 t 具有一阶连续偏导数, 利用奥氏公式, 可以把上式化为

$$\begin{aligned} & \int_{t_1}^{t_2} \iiint_{\Omega} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial u}{\partial z} \right) \right\} dx dy dz dt \\ &= \iiint_{\Omega} c \rho \left(\int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial u}{\partial t} dt \right) dx dy dz, \end{aligned}$$

交换积分次序, 可以得到

$$\int_{t_1}^{t_2} \iiint_{\Omega} \left[c \rho \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial u}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial u}{\partial z} \right) \right] dx dy dz dt = 0.$$

由于 t_1, t_2 , 与区域 Ω 都是任意的, 我们得到

$$c\rho \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial u}{\partial z} \right). \quad (1.2.3)$$

(1.2.3) 式称为非均匀的各向同性体的热传导方程. 引进记号 $\nabla = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z}$, 上式可写为

$$c\rho \frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot k \nabla u. \quad (1.2.4)$$

如果区域 G 内存在热源的话, 用 $w = w(x, y, z, t)$ 表示, 代表在单位时间内单位体积所产生的热. 此时方程为

$$c\rho \frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot k \nabla u + w. \quad (1.2.5)$$

如果物体是均匀的, 此时 k, c 及 ρ 为常数, 记 $\frac{k}{c\rho} = a^2$, 则 (1.2.3) 变为

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right), \quad (1.2.6)$$

这就是热传导方程的典型形式. 常记作

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \Delta u, \quad (1.2.7)$$

其中 $\Delta = \nabla \cdot \nabla = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$.

1.3 定解条件

为了唯一确定描绘温度变化的函数 $u(x, y, z, t)$, 就不能只依赖于方程, 还必须考察物体所处的外界状况以及起始时的状况. 描述这种状况的数学条件分别称为边界条件及初始条件. 热传导方程最自然的一个定解问题就是在已给的初始条件与边界条件下求问题的解.

初始条件的提法显然为

$$u(x, y, z, 0) = \varphi(x, y, z). \quad (1.3.1)$$

边界条件的提法一般有三种:

1. Dirichler 或第一种边界条件: 物体与外界接触的表面的温度是已知的, 即有

$$u(x, y, z, t)|_{(x,y,z) \in \Gamma} = f(x, y, z, t). \quad (1.3.2)$$

2. Neumann 或第二种边界条件, 表面各点的单位面积上在单位时间内所流过的热量 Q 是已知的. 根据 Fourier 定律:

$$\frac{dQ}{dsdt} = -k \frac{\partial u}{\partial n},$$

就可明白, 这种外界条件实际上表示温度 u 在曲面上的法向导数是已知的, 即有

$$\left. \frac{\partial u}{\partial n} \right|_{(x,y,z) \in \Gamma} = f(x, y, z, t). \quad (1.3.3)$$

3. Robin 或第三种 (或混合) 边界条件: 考察物体放在另一介质中的情形, 假定与物体接触处另一介质的温度为 u_1 , 根据 Newton 定律: 物体从一介质流到另一介质的热量和两介质间的温度差成正比:

$$dQ = k_1(u - u_1)dSdt,$$

这里的比例常数 k_1 称为两种介质间的热传导系数, 它也取正值. 考察在物体中无限贴近于此表面的曲面 Γ_1 , 由于在物体表面热量不能积累, 因此在曲面 Γ_1 上的热量流速应等于表面 Γ 上的热量流速. 流过曲面 Γ_1 的热量由 Fourier 定律确定, 而流过物体表面 Γ 的热量由 Newton 定律所决定, 因此成立着关系式

$$-k \frac{\partial u}{\partial n} dSdt = k_1(u - u_1)dSdt,$$

即

$$k_1 u + k \frac{\partial u}{\partial n} = k_1 u_1.$$

由于 k_1 及 k 都是正数, 因此这种边界条件可以写成

$$\left(\frac{\partial u}{\partial n} + \sigma u \right) \Big|_{(x,y,z) \in \Gamma} = f(x, y, z, t), \quad (1.3.4)$$

这里 σ 为已知正数.

上述 $f(x, y, z, t)$ 是定义在 $(x, y, z) \in \Gamma, 0 \leq t \leq T$ 的已知函数.

初始条件、边界条件称为定解条件.

对于只有初始条件, 没有边界条件的定解条件称为 Cauchy 问题. 如:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \Delta u, \\ u|_{t=0} = \varphi(x, y, z) \quad (-\infty < (x, y, z) < +\infty). \end{cases} \quad (1.3.5)$$

对于既有初始条件, 又有边界条件的定解问题称为混合问题.

一个定解问题如果它的解存在、唯一而且稳定 (或称解连续依赖于定解条件), 就称这个定解问题是适定的. 在本书所讨论的定解问题都是适定的, 但是确实也存

在有很多不适定问题需要讨论和求解, 它们在物理学、地质学和石油科学等很多领域有十分重要的作用. 有一个基本手法就是化不适定问题为适定问题, 另加最优控制来实现求解, 在本书中不作深入地讨论.

1.4 抛物型方程的特征

为简单计, 我们考察一维的热传导方程的定解问题:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, & (-\infty < x < +\infty), \\ u|_{t=0} = \varphi(x) \end{cases} \quad (1.4.1)$$

$$(1.4.2)$$

其中函数 $\varphi(x)$ 是 $-\infty < x < +\infty$ 上的有界连续函数.

我们可以用傅氏变换的办法求得解为

$$u(x, t) = \frac{1}{2a\sqrt{t\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\xi) e^{-\frac{(x-\xi)^2}{4a^2t}} d\xi, \quad (1.4.3)$$

公式 (1.4.3) 称为泊松公式, 其右端的积分称为泊松积分.

图 1.1 给出了初始的三角分布以及以后各时刻的演化. 特点是波形的棱角消失, 逐渐平滑化. 不管初始分布如何集中, 它总是在瞬间之间影响于无穷, 可以说是以无限的速度来传播影响的, 虽然这种影响是随距离按指数状衰减. 实际上当然不可能以无限大的速度传播着. 因为热的传导定律只是客观规律的近似反映, 它没有涉及分子运动过程中的惯性. 如果把它数学形式绝对化, 就会得出热的传导速度是无限的荒谬结论, 但从这里至少可以看到热传导对远处和近处的影响只是程度上的

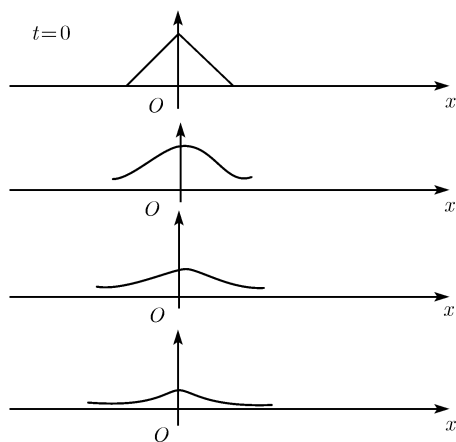


图 1.1

差别, 而没有已传播到和未传播到之间的明显的分界线. 这是抛物型方程的主要特征. 在数值计算过程中所建立起来的离散方程也不能违背抛物型方程的物理机理.

有时候, 我们也常说抛物型方程有一条 $t = \text{常数}$ 的特征线. 为此, 在此叙述一点关于特征线知识.

考虑一般的二阶偏微分方程:

$$L[u] = A \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2B \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} - H \left(x, y, u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y} \right) = 0. \quad (1.4.4)$$

若 A, B 和 C 仅是自变量 x, y 的函数, 则称方程 (1.4.4) 为半线性的. 若 A, B 和 C 是 $x, y, u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}$ 的函数 (即对未知函数的所有最高阶导数来说是线性的), 则方程 (1.4.4) 称为拟线性的; 若 A, B 和 C 是 x, y 的函数, H 是 $u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}$ 的线性函数, 则方程 (1.4.4) 称为线性的.

两个自变量 x 和 y 的一般的二阶线性偏微分方程可表为

$$\begin{aligned} & A(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2B(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \\ & + D(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} + E(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} + F(x, y)u + G(x, y) = 0. \end{aligned} \quad (1.4.5)$$

若 $G = 0$, 称为齐次的, 否则称为非齐次的.

方程 (1.4.4) 或方程 (1.4.5) 的解将表为: $u = u(x, y)$, 在 (x, y, u) 空间中表示一个曲面, 叫做积分曲面. 若在积分曲面上存在曲线 $\Gamma: x = x(s), y = y(s), u = u(x(s), y(s)) = u(s)$, s 是参数, 当越过此曲线时, 偏导数 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}$ 是间断的或不确定的, 这种曲线称为特征线.

$$\frac{du}{ds} = \frac{\partial u}{\partial x} \frac{dx}{ds} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{dy}{ds},$$

记 $\frac{\partial u}{\partial x} = p = p(x, y), \frac{\partial u}{\partial y} = q = q(x, y)$, 就有

$$\frac{dp}{ds} = \frac{\partial p}{\partial x} \frac{dx}{ds} + \frac{\partial p}{\partial y} \frac{dy}{ds} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \frac{dx}{ds} + \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \frac{dy}{ds}, \quad (1.4.6)$$

$$\frac{dq}{ds} = \frac{\partial q}{\partial x} \frac{dx}{ds} + \frac{\partial q}{\partial y} \frac{dy}{ds} = \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \frac{dx}{ds} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \frac{dy}{ds}. \quad (1.4.7)$$

鉴于方程 (1.4.4), (1.4.6), (1.4.7) 是 $A, B, C, H, \frac{dx}{ds}, \frac{dy}{ds}, p, q, \frac{dp}{ds}, \frac{dq}{ds}$ 在 Γ 上每点都是已知的, 这三个方程都能看作 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}, \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$ 为未知数的方程组. 要这个方

程组不存在唯一解, 必有

$$\begin{vmatrix} A & 2B & C \\ \frac{dx}{ds} & \frac{dy}{ds} & 0 \\ 0 & \frac{dx}{ds} & \frac{dy}{ds} \end{vmatrix} = 0. \quad (1.4.8)$$

简化后为:

或
$$A \left(\frac{dy}{ds} \right)^2 - 2B \frac{dx}{ds} \frac{dy}{ds} + C \left(\frac{dx}{ds} \right)^2 = 0, \quad (1.4.9)$$

$$\frac{dy}{dx} = \frac{1}{A} (B \pm \sqrt{B^2 - AC}). \quad (1.4.10)$$

方程 (1.4.10) 能分成两个:

$$\begin{aligned} A dy - (B + \sqrt{B^2 - AC}) dx &= 0, \\ A dy - (B - \sqrt{B^2 - AC}) dx &= 0, \end{aligned} \quad (1.4.11)$$

这些解能表示成

$$\begin{aligned} V_1(x, y) &= \text{const.} \\ V_2(x, y) &= \text{const.} \end{aligned} \quad (1.4.12)$$

$B^2 - AC > 0$, 存在两个不同实的特征线, 称为双曲型;

$B^2 - AC = 0$, 存在一个实的重的特征线, 称为抛物型;

$B^2 - AC < 0$, 不存在实的特征线, 称为椭圆型.

在一般线性问题中, 系数 A, B, C 依赖于位置, 方程的类型也依赖于位置. 在拟线性情况下, 方程的类型不仅依赖于位置, 而且也依赖在那个位置上解的性质. 若 A, B, C 是常数, 方程的类型是在整个 x, y 平面上.

对方程 (1.4.1) 而言, $A = a^2, B = 0, C = 0$, t 相当于 y , 代入 (1.4.10), 则有

$$\frac{dt}{dx} = 0, \quad (1.4.13)$$

所以 $t = \text{常数}$.

因为问题 (1.4.1), (1.4.2) 的解 (1.4.3) 依赖于整个初始函数, 而不仅仅是一个有限的依赖区间. 这个事实也就使我们预想到近似的差分方程的稳定性问题将要比双曲型方程麻烦得多.

由物理问题归结出来的偏微分方程在求解之前, 一般来说应作无量纲化处理. 例如设微分方程为

$$\frac{\partial u}{\partial T} = k \frac{\partial^2 u}{\partial X^2}, \quad k = \text{常数}. \quad (1.4.14)$$

用 L 表示 X 所定义的区间长度, u_0 表示在 $T = 0$ 时某个特定值, 比如极大值或极小值.

令

$$x = \frac{X}{L}, \quad u = \frac{U}{U_0},$$

则

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial X} &= \frac{\partial U}{\partial x} \frac{dx}{dX} = \frac{\partial U}{\partial x} \frac{1}{L}, \\ \frac{\partial^2 U}{\partial X^2} &= \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial U}{\partial X} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{L} \frac{\partial U}{\partial x} \right) \frac{dx}{dX} = \frac{1}{L^2} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}, \end{aligned}$$

方程 (1.4.14) 变为:

$$\frac{\partial(uU_0)}{\partial T} = \frac{k}{L^2} \frac{\partial^2(uU_0)}{\partial x^2},$$

即

$$\frac{1}{kL^{-2}} \frac{\partial u}{\partial T} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

令 $t = \frac{kT}{L^2}$, 则得到

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (1.4.15)$$

这就是方程 (1.4.14) 的无量纲形式, 且对于 x 而言, 它的变化区间长度是 1.

1.5 方程举例

例 1 考虑化学反应系统, 若把 u 表示为物质的浓度, k 为扩散常数, $c\rho$ 取为 1, w 表示物质的生成率, 则方程 (1.2.5) 就描述一物质通过一可渗透系统的扩散.

例 2 在星体内的热传导, 其中能量的转移除了借助于热传导外还有辐射. 若物质是静止的, 则在星体各处热的传导除在一极薄的表面层外, 十分准确地遵循 (1.2.5) 方程, 但记号的意义却有下列的改变:

$$c\rho = \text{单位体积的物质的热容量} + 4a_0T^3,$$

$$k = \text{物质的导热系数} + 4a_0C_0T^3/3k\rho,$$

其中 a_0 是 Stefan-Boltzmann 常数, C_0 是光速, $k = k(\rho, T)$, 是关于星体物质的 Rosseland 平均不透明系数.

例 3 考虑放射性物质, 其蜕变的半衰期为 τ , 单纯由蜕变所导致的浓度的时间变化率为 $-\frac{\ln 2}{\tau}u$, 则有方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} - a^2 \Delta u + \frac{\ln 2}{\tau} u = 0.$$

如果研究的物质是由于链式反应而增殖, 浓度增殖的时间变化率为 b^2u , 则就有

$$\frac{\partial u}{\partial t} - a^2 \Delta u - b^2 u = 0.$$

例 4 电学中海底电缆的电压 u 满足方程:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = k \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

其中 $k = RC$, R 为电阻, C 为电容.

例 5 导电线圈所围的柱体内的磁场 u 满足方程:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \Delta u,$$

其中 $a^2 = c^2/4\pi\mu\sigma$, c 是光速, μ 是磁导率, σ 是电导率.

例 6 具有负压力散度的不可压缩黏性液体对半无限平板绕流的边界层问题, 其方程是

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sqrt{(1-t)^2 - u} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}.$$

例 7 描写在多孔介质中一维完全气体等温气体的方程是

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 U^2}{\partial X^2}.$$

例 8 对流——扩散方程为

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} - b \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - q = 0 \quad a \leq 0 \quad b \geq 0.$$

例 9 杆的弹性振动在一定的假设下的方程为

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = -a^2 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}, \quad a = \text{const.}$$

令 $\frac{\partial u}{\partial t} = v$, $a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = w$, 则为

$$\begin{cases} \frac{\partial v}{\partial t} = -a \frac{\partial^2 w}{\partial x^2}, \\ \frac{\partial w}{\partial t} = a \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}. \end{cases}$$

例 10 生物化学中带扩散项的 Brusselator 振子

$$\begin{cases} \frac{\partial u_1}{\partial t} = A - (B+1)u_1 + u_1^2 u_2 + D_1 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2}, \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} = B u_1 - u_1^2 u_2 + D_2 \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2}, \end{cases}$$

其中 A, B 是正常数, u_1, u_2 为反应物的浓度, D_1, D_2 分别为 u_1, u_2 的扩散系数.

实际问题中所遇到的抛物型方程之例是很多的, 不胜枚举. 而且往往是很复杂的, 一般是变系数, 或者是非线性的; 常常会遇到包含不同类型 (比方说, 双曲型和抛物型方程) 相耦合的方程组; 常常有若干个空间变量; 并且也常常会遇到积分-微分的方程. “计算物理学” 的任务之一就是要研究在计算机上对抛物型方程进行数值计算的技巧和方法. 所用的方法有: 有限差分法、有限单元法、有限体积法、谱方法、蒙特卡罗 (Monte Carlo) 方法, 等等. 一般采用的是有限差分方法, 这是本书研究的重点. 下面, 首先转向有限差分方法的基础知识介绍.

第二章 有限差分方法的基础知识

2.1 引言

能用解析方法求解的抛物型偏微分方程是仅限于少数常系数的线性方程, 绝大多数是不能用公式求通解的, 必须采用近似方法. 在各种不同的近似方法中, 差分方法是最重要的方法之一. 我们对要求的解不是函数的表达式, 而只要求在空间、时间平面上某些点上的值. 由于快速电子计算机的出现, 这种方法的应用更为容易, 且更为广泛, 这就助长了有限差分方法的发展. 差分方法是求空间时间平面上某些特定点的值, 它是随着所选取的空间网格和时间步长而定的, 其主要思想是用函数值的线性组合来代替导数, 把微分方程变为函数值的线性代数方程, 微分方程的边值问题就变成线性代数方程组的问题.

由于椭圆型方程原则地区别于抛物型方程和双曲型方程, 差分法对这两类微分方程的应用也有很大的差别. 椭圆型方程的差分问题直接归结为解线性代数方程组, 其主要问题是讨论解法 (直接法和间接法) 的好坏. 而抛物型和双曲型方程 (亦统称为发展方程或演化方程) 是沿时间 t 轴“按步地” (或“按层地”) 求解差分的问题, 当然最终也是归结为求解线性代数方程组的问题. 但它们的基本问题是每个差分方程的收敛性和稳定性, 尤其是稳定性问题. 由 Lax 等价定理告诉我们, 对一个适定的线性的初值问题, 对相容的差分逼近式来说, 稳定性则是差分方程的解收敛于微分方程的解的充分必要条件. 而抛物型差分方程的稳定性又要比双曲型差分方程麻烦得多, 所以我们在第三章中专门介绍各种求稳定性条件的方法.

用差分法解抛物型方程 (对双曲型方程亦是如此) 时所产生的困难基本上是两点: 一是最简单格式, 乍一看来, 特别是从实用的观点看来是很诱惑人的, 但对稳定因素特别敏感. 为了保证收敛, 必须对时间步长加上与空间步长有关的限制条件. 二是从稳定性观点看来是很好的格式, 实际应用时却不方便. 所以出现了一系列的研究工作, 提出了各种不同的格式. 未必能指出哪个格式是绝对好的, 每个格式都各有优缺点, 针对不同的问题采用不同的差分格式, 这正是我们要不断地研究和发展的意义所在. 在通常的情况下, 是要寻找较弱的条件限制, 较高的精确度, 较方便的编制程序和较少的机器计算时间的格式. 要注意, 不要追求逼近阶太高, 以致逻辑复杂得没有必要; 又如逻辑太简单而稳定性要求太严, 以致机器计算的时间太多. 总之, 选取差分格式要全面地具体地考虑. 苏联索伯列夫院士说得好, 判别一个数值方法好坏的唯一原则是“每个解的数字值多少卢布”.

2.2 差分方程的形成

2.2.1 离散化及由此产生的问题

由于电子计算机的离散结构, 它只能处理离散变量. 用它来解连续问题之前, 就必须把问题化成包含有很多未知数的形式. 为简单计, 仅对两个变量来进行讨论, 对多个变量亦适用.

首先将独立变量 (x, t) 的定义区域 G 被换成一个有限集合 S , 其元素的个数 N 可以相当大. 每个连续变化的函数 $u(x, t)$ 被换成定义在 S 上的一个函数 $U(p)$, 于是确定 $u(x, t)$ 的偏微分方程的问题被换成确定函数 $U(p)$ 的有限联合方程组, 我们称这个过程为离散化. 通常每个 p 都是 $G \cup \partial G$ 内或其附近的一个点 (x_p, t_p) , 其中 ∂G 是 G 的边界. 有限差分方法就是把决定 $U(p)$ 的联立方程组变为有限差分方程组.

对 U 在点 (x_p, t_p) 的值的看法有两种观点: 一种观点是看成孤立的值, 并且在讨论 $u - U$ 之差时, 只与 $u(x_p, t_p)$ 比较. 另一种观点是把 $U(x_p, t_p)$ 看作在点 (x_p, t_p) 附近小邻域中所有点上函数 $U(x, t)$ 的值的代表点, 这种观点的实际优点首先在困难的几何形状下, 例如在交接面附近, 它可帮助我们建立关于 $U(x_p, t_p)$ 的较好的差分方程; 其次由于允许 U 和 u 的自变量 (x, t) 有相同的定义域, 所以 U 和 u 可想象成属于同一函数空间, 这就大大有助于分析.

对偏微分方程的离散化引起了许多既是实际的又是数学的问题, 主要是两类问题: 一类是离散化得到的离散模型的可靠性问题; 能否保持问题的物理与数学的特性? 能否给出具有所要求精确度的结果? 另一类是可行性问题: 按计算机的速度和存贮量能否实现, 代价如何? 是否比较简单, 通用, 灵活, 便于掌握和推广? 可靠性问题是我们讨论的主题. 而可行性问题, 在本书中, 不去过多地涉及.

2.2.2 离散化的主要途径^[3]

我们在比较差分格式好坏时总是在下列的所谓“模型”问题上进行的.

定义在区域 $\bar{G} = \{0 \leq x \leq 1, 0 \leq t \leq T\}$ 内的函数 $u(x, t)$ 满足:

$$\text{方程: } \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad 0 < x < 1, \quad 0 \leq t \leq T, \quad (2.2.1)$$

$$\text{初始条件: } u(x, 0) = f(x), \quad 0 \leq x \leq 1. \quad t = 0, \quad (2.2.2)$$

$$\text{边界条件: } \begin{cases} u(0, t) = \varphi_1(t), \\ u(1, t) = \varphi_2(t), \end{cases} \quad 0 \leq t \leq T, \quad (2.2.3)$$

对区域 G 作网格剖分, 网格有直角网格、斜网格、三角形网格、六角形网格等, 但大都采用直角网格 (矩形网格), 即用间隔为 $\Delta t = k$, 划出平行于 x 轴的平行

线, $t_n = nk \left(n = 0, 1, 2, \dots, \left[\frac{T}{k} \right] \right)$, 再用间隔为 $\Delta x = h$, 划出平行于 t 轴的平行线, $x_j = jh \ (j = 0, 1, \dots, J, Jh = 1)$. 互为正交的两族平行线的交点, 称为网格点 (节点或结点或格子点). k, h 分别称为时间、空间的步长. 步长取为固定不变时, 称为定步长 (或等距步长), 否则称为变步长 (或不等距步长). 用 U_j^n 表示 u 在点 (x_j, t_n) 的近似值, 用 u_j^n 表示 u 在点 (x_j, t_n) 的精确值.

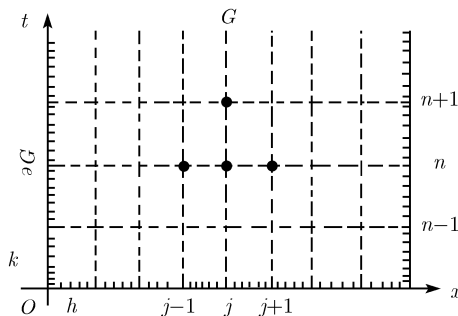


图 2.1 网格剖分

2.2.2.1 基于 Taylor 级数展开 (基于数值微分)

假定 $u(x, t)$ 具有下列 Taylor 开展式中出现的各阶连续偏导数. 我们考虑“模型”问题在网格点 (jh, nk) 的差分逼近式:

令 $u_j^n = u(x_j, t_n) = u(jh, nk)$,

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= u(x_j, t_{n+1}) = u(x_j, t_n + k) \\ &= u_j^n + k \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)_j^n + \frac{1}{2!} k^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right)_j^{n+\theta_1}, \quad 0 < \theta_1 < 1, \end{aligned} \quad (2.2.4)$$

$$\begin{aligned} u_{j\pm 1}^n &= u(x_{j\pm 1}, t_n) = u(x_j \pm h, t_n) = u_j^n \pm h \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_j^n + \frac{1}{2!} h^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_j^n \\ &\quad \pm \frac{h^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_j^n + \frac{1}{4!} h^4 \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right)_{j\pm\theta_2}^n, \quad 0 < \theta_2 < 1, \end{aligned}$$

$$u_{j+1}^n - u_{j-1}^n = 2h \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_j^n + \frac{2}{3!} h^3 \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_j^n + \dots,$$

所以有

$$\begin{aligned} \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{h} &= \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_j^n + O(h) && \text{向前差商,} \\ \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{h} &= \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_j^n + O(h) && \text{向后差商,} \\ \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2h} &= \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_j^n + O(h^2) && \text{中心差商,} \end{aligned} \quad (2.2.5)$$

$O(h)$ 或 $O(h^2)$ 称为用差商代替微商时的局部截断误差, 或称逼近误差. h 上方的指数就称为逼近的阶. 由此可见, 中心差商的精确度高些.

$$\frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} = \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_j^n + O(h^2). \quad (2.2.6)$$

注 记号“大 O ”: $\beta = O(\alpha)$, 表示 β 是与 α 同阶无穷小量, 即当 α 足够小时, 有 $\left| \frac{\beta}{\alpha} \right| < M$, 这里 M 为一正的常数.

记号“小 o ”: $\beta = o(\alpha)$. 表示 β 是比 α 更高阶无穷小量, 即当 α 足够小时, $\frac{\beta}{\alpha} = 0$.

若被差分的点 (jh, nk) 与相邻的节点是以图 2.2 所示的分布:

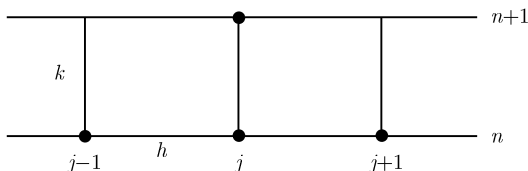


图 2.2 四点显式格式网格点

于是有

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{k} - \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} - \left\{ \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right\}_j^n = O(k + h^2),$$

相应的差分方程为

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{k} = \frac{U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n}{h^2} \quad (j = 1, 2, \dots, J-1). \quad (2.2.7)$$

$O(k + h^2)$ 称为差分方程组的局部截断误差, 它在一定的意义下说明了用差分表达式代替微分表达式所产生的误差当步长变得越来越小趋于零的快慢程度. 差分方程的全体称为差分格式, 方程 (2.2.7) 称为四点古典显式格式.

$$\begin{aligned} \text{初始条件: } & U_j^0 = f(jh) \quad j = 0, 1, \dots, J, \\ \text{边界条件: } & \begin{cases} U_0^n = \varphi_1(nk) \\ U_J^n = \varphi_2(nk) \end{cases} \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (2.2.8)$$

注意上式的格式中, 对时间 t 来说仅用到 n 层, $n+1$ 层上的网格点, 称为二层差分格式, 若用到三个时间层上的网格点, 称为三层格式. 高于二层的格式统称为多层格式. $n+1$ 层上只有一个网格点的格式称为显式格式, 用到 $n+1$ 层上两个网格点以上的格式称为隐式格式.

用 Taylor 级数开展来构造差分格式, 给出逼近的阶是方便的.

作为练习, 类似地可给出四点古典隐式格式为

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{k} = \frac{U_{j+1}^{n+1} - 2U_j^{n+1} + U_{j-1}^{n+1}}{h^2}, \quad (2.2.9)$$

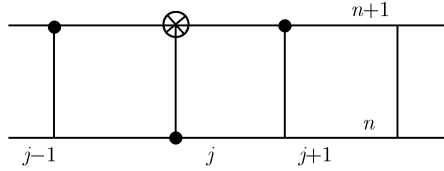


图 2.3 四点隐式格式网格点

局部截断误差是 $O(k + h^2)$.

六点对称格式 (Crank-Nicolson 格式)

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{k} = \frac{1}{2h^2}(U_{j+1}^{n+1} - 2U_j^{n+1} + U_{j-1}^{n+1}) + \frac{1}{2h^2}(U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n). \quad (2.2.10)$$

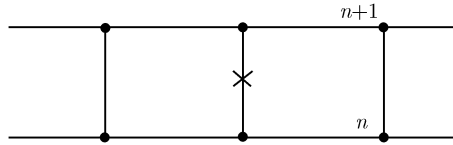


图 2.4 六点对称格式网格点

局部截断误差是 $O(k^2 + h^2)$. 显见, 这种方法是基于差商来替代微商, 故可称基于数值微分的方法.

2.2.2.2 基于数值积分 (有限体积法)

令 $g = \frac{\partial u}{\partial x}$, 则 (2.2.1) 可改写为

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial g}{\partial x} = 0. \quad (2.2.11)$$

若在区域 Ω 上积分 (2.2.11), 由格林公式有

$$\iint_{\Omega} \left(\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial g}{\partial x} \right) dx dt = \oint_{\Gamma} (g dt + u dx), \quad (2.2.12)$$

其中 Γ 为 Ω 的边界. 若 $u(x, t)$ 为 (2.2.11) 的解, 则由 (2.2.12) 可见, 对任意按段光滑围道 Γ 有

$$\oint_{\Gamma} (g dt + u dx) = 0, \quad (2.2.13)$$

反之, 若 $u(x, t) \in C^{2,1}$, 对任意边与坐标轴平行的多边形闭围道 (2.2.13) 成立, 则 $u(x, t)$ 必为 (2.2.11) 的解. 一般说来, 满足 (2.2.13) 的解可以不光滑, 甚至有间断, 因此不是 (2.2.11) 的古典解, 而称为它的广义解.

由此可见, (2.2.13) 与 (2.2.11) 是等价的, 于是针对 (2.2.13) 设计的数值积分法也就是 (2.2.11) 的数值解法.

构造 (2.2.13) 的数值积分法分为两步: 第一步适当选取积分围道 Γ ; 第二步适当选取线积分的近似求积公式.

例如选取的 Γ 图 2.5 所示, 沿 Γ 各段积分采用梯形积分公式, 则由 (2.2.13) 有

$$\left(\int_{(j-\frac{h}{2},n)}^{(j+\frac{h}{2},n)} + \int_{(j+\frac{h}{2},n)}^{(j+\frac{h}{2},n+1)} + \int_{(j+\frac{h}{2},n+1)}^{(j-\frac{h}{2},n+1)} + \int_{(j-\frac{h}{2},n+1)}^{(j-\frac{h}{2},n)} \right) (gdt + udx) = 0,$$

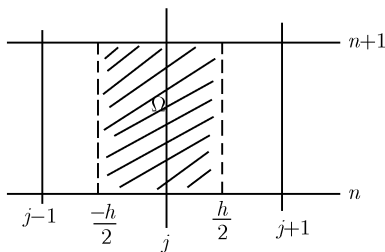


图 2.5 积分围道 Γ 示意图

即

$$\begin{aligned} & \frac{h}{2} \left(U_{j+\frac{h}{2}}^n + U_{j-\frac{h}{2}}^n \right) + \frac{k}{2} \left(g_{j+\frac{h}{2}}^{n+1} + g_{j+\frac{h}{2}}^n \right) \\ & - \frac{h}{2} \left(U_{j+\frac{h}{2}}^{n+1} + U_{j-\frac{h}{2}}^{n+1} \right) - \frac{k}{2} \left(g_{j-\frac{h}{2}}^{n+1} + g_{j-\frac{h}{2}}^n \right) = 0. \end{aligned}$$

因

$$g_{j+\frac{h}{2}} - g_{j-\frac{h}{2}} = \frac{U_{j+1} - U_j}{h} - \frac{U_j - U_{j-1}}{h} = \frac{U_{j+1} - 2U_j + U_{j-1}}{h},$$

于是有

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \left(U_{j-\frac{1}{2}}^{n+1} + U_{j+\frac{1}{2}}^n \right) &= \frac{1}{2} \left(U_{j-\frac{1}{2}}^n + U_{j+\frac{1}{2}}^n \right) + \frac{k}{2h^2} \{ (U_{j-1}^{n+1} - 2U_j^{n+1} + U_{j+1}^{n+1}) \\ &+ (U_{j-1}^n - 2U_j^n + U_{j+1}^n) \}. \end{aligned} \quad (2.2.14)$$

不难看出, 格式 (2.2.14) 的局部截断误差是 $O(k^2 + h^2)$.

如果沿 x 轴方向积分, 采用中矩形公式, 则代替 (2.2.14) 中 $\frac{1}{2} (U_{j-\frac{1}{2}}^{n+1} + U_{j+\frac{1}{2}}^n)$ 的是 U_j^{n+1} , 于是就可以得到六点对称格式 (2.2.10).

从积分关系出发构造差分格式的好处是可以处理间断现象, 对内部分界面和非均匀网格的问题, 它能给出简单的差分公式, 并能处理较复杂的边界条件. 这种利用守恒定律的积分形式来构造的差分格式是比较容易得到守恒形式的.

若从 (2.2.12) 左端出发有 $\iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} dx dt = \iint_{\Omega} \frac{\partial g}{\partial x} dx dt$, 直接求积可得

$$\int_{x_j - \frac{h}{2}}^{x_j + \frac{h}{2}} [u(t_n + k, x) - u(t_n, x)] dx = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left[g\left(t, x_j + \frac{h}{2}\right) - g\left(t, x_j - \frac{h}{2}\right) \right] dt.$$

应用数值积分可得

$$\begin{aligned} [u(t_n + k, x_j) - u(t_n, x_j)]h &\approx \left[\frac{\partial u}{\partial x}\left(t_n, x_j + \frac{h}{2}\right) - \frac{\partial u}{\partial x}\left(t_n, x_j - \frac{h}{2}\right) \right] k \\ &\approx \left[\frac{u(t_n, x_{j+1}) - u(t_n, x_j)}{h} - \frac{u(t_n, x_j) - u(t_n, x_{j-1})}{h} \right] k. \end{aligned}$$

由此得出

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{k} = \frac{U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n}{h^2}.$$

这就是 (2.2.7) 式.

基于数值积分也称为有限体积法.

2.2.2.3 基于变分公式

从变分公式出发构造差分格式, 这是有限元方法的基础, 其大致步骤为: 第一步是把微分方程的定解问题化为等价的变分问题, 即某个泛函的极小值问题; 第二步区域剖分; 第三步是选好基函数; 第四步求出代数方程的系数矩阵, 并求出它的解. 其中第三步也可代之以: 直接对泛函作数值逼近, 使每个离散泛函取极小, 推导出线性方程组来. 这个方法对椭圆型方程特别有效, 因为椭圆型方程具有自共轭性质, 可以保证被得到的线性方程组所对应的矩阵具有正定性质. 对抛物型方程则大多采用 Galerkin 有限元法, 即不是把定解问题化为变分问题, 而是直接利用微分方程对基函数内积的方程出发. 即令

$$u^{(h)}(x, t) = \sum_{j=1}^{J-1} Q_j(t) \varphi_j(x),$$

其中 φ_j 是已知的解析函数, 通常称为试探函数. 不妨设边界条件为

$$u(0, t) = u(1, t) = 0 \quad t \geq 0.$$

按照 Galerkin 过程应该要求 $u^{(h)}(x, t)$ 满足下列方程组

$$\int_0^1 \left(\frac{\partial u^{(h)}}{\partial t} - \frac{\partial^2 u^{(h)}}{\partial x^2} \right) \varphi_s(x) dx = 0 \quad s = 1, 2, \dots, J-1,$$

即有

$$\sum_{j=1}^{J-1} \int_0^1 \left(\frac{\partial Q_j(t)}{\partial t} \varphi_j(x) \varphi_s(x) + Q_j(t) \frac{\partial \varphi_j(x)}{\partial x} \frac{\partial \varphi_s(x)}{\partial x} \right) dx = 0, \quad s=1, 2, \dots, J-1,$$

令矩阵 $\mathbf{M} = (m_{j,s})_{(m-1) \times (m-1)}$, $\mathbf{N} = (n_{j,s})_{(m-1) \times (m-1)}$; 向量 $\mathbf{Q} = (Q_1, Q_2, \dots, Q_{J-1})^T$, 其中

$$m_{j,s} = \int_0^1 \varphi_j \varphi_s dx, \quad j, s = 1, 2, \dots, m-1,$$

$$n_{j,s} = \int_0^1 \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \cdot \frac{\partial \varphi_s}{\partial x} dx, \quad j, s = 1, 2, \dots, m-1,$$

则上述方程组可以写为 $\mathbf{M}\mathbf{Q}' + \mathbf{N}\mathbf{Q} = 0$. 其中 \mathbf{M}, \mathbf{N} 都是按单元编号不同而形成的单元刚度矩阵, 这样就得到了自变量为 t 的常微分方程组. 在 $\left(n + \frac{1}{2}\right) \Delta t$ 时间层上利用中心差商, 就得到差分方程:

$$\mathbf{M} \frac{\mathbf{Q}^{n+1} - \mathbf{Q}^n}{\Delta t} + \mathbf{N} \frac{\mathbf{Q}^{n+1} + \mathbf{Q}^n}{2} = 0. \quad (2.2.15)$$

注意这里所用的方法实际上是用有限元方法关于空间变量 x 离散所给定的偏微分方程, 然后关于时间变量 t 用差分方法离散所得到的常微分方程组.

基于变分公式的差分格式对所谓自然边界条件以及由间断引起的内边界接触条件能自动地满足, 对于解, 系数, 网格等不规则性都比较易于适应. 在此情况下, 尽管所得到的差分格式在形式上可能很复杂, 但它的构成原则却还是很简单的, 也不难用程序实现.

2.2.2.4 待定系数法^[4]

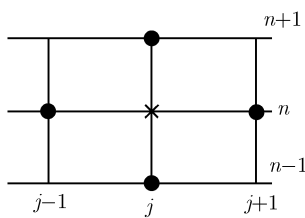


图 2.6 四节点分布图

在构造差分格式时最简单的办法就是把微分方程中每一个微商用差商来代替而得. 但是更一般的方法却不是分别地近似每一个微商, 而是直接地代替整个微分算子. 其方法的实质是把解写成关于 x 与 t 的级数形式, 然后选取系数, 使得能够消去的项数最多. 这样, 对给定的节点分布就能得到精度最高的公式. 这一点常常是其他方法做不到的.

例如: 按给定的节点分布图求差分格式:

$$\text{令 } L[u] = \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \text{ 记 } L_h[u^{(h)}] = a_0^1 u_j^{n+1} + a_0^{-1} u_j^{n-1} + a_1^0 u_{j+1}^n + a_{-1}^0 u_{j-1}^n = 0,$$

其中 $a_0^1, a_0^{-1}, a_1^0, a_{-1}^0$ 为待定系数. 取 $k = rh^2$, 要求选择的待定系数, 使之 L_h 逼近于 L 为

$$\left(L_h[u^{(h)}] \right)_j^n = (L[u])_j^n + O(h^2).$$

我们总是假定 $u(x, t)$ 是充分光滑的, 利用泰勒展开:

$$\begin{aligned} u(jh, (n \pm 1)k) &= u(jh, nk) \pm k \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)_j + \frac{k^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right)_j \pm \cdots, \\ u((j \pm 1)h, nk) &= u(jh, nk) \pm h \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_j + \frac{h^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_j \pm \cdots, \end{aligned}$$

代入 $L_h[u_h^k]$ 的表达式中得

$$a_0^1 = \frac{1}{2k} + \frac{1}{h^2}, \quad a_0^{-1} = \frac{1}{h^2} - \frac{1}{2k}, \quad a_1^0 = a_{-1}^0 = -\frac{1}{h^2},$$

最后得到的差分格式为

$$\frac{1}{2k} (U_j^{n+1} - U_j^{n-1}) - \frac{1}{h^2} (U_{j+1}^n + U_{j-1}^n - U_j^{n+1} - U_j^{n-1}) = 0. \quad (2.2.16)$$

这就是很有名的 DuFort & Frankel 格式 (即菱形格式), 它是一个显式三层格式, 恒稳定. 此格式还有一个令人有趣味的事是如果取 $k = rh$, 则 (2.2.16) 不逼近于方程: $\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$, 而是逼近于方程:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + r^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0.$$

作为练习, 推导如图 2.7 所给的节点分布, 求解方程: $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 的差分计算公式 (取 $k = rh^2$) 是:

$$\begin{aligned} U_j^{n+1} &= U_j^n + \left(r + \frac{1}{6} \right) \frac{U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n}{2} \\ &\quad + \left(r - \frac{1}{6} \right) \frac{U_{j+1}^{n+1} - 2U_j^{n+1} + U_{j-1}^{n+1}}{2}, \end{aligned} \quad (2.2.17)$$

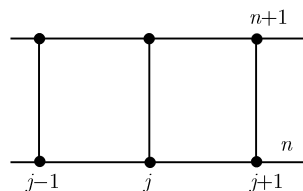


图 2.7 六节点分布图

局部截断误差是 $O(h^4)$.

用差商代替微商的构造差分格式的方法, 则得

$$U_j^{n+1} = U_j^n + r \frac{U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n}{2} + r \frac{U_{j+1}^{n+1} - 2U_j^{n+1} + U_{j-1}^{n+1}}{2},$$

这就是六点对称格式.

2.3 差分方程的基本要求

这里我们主要叙述由离散化后得到的有限差分方程的可靠性有关的一些基本概念.

2.3.1 局部截断误差和相容性

相容性是指差分方程是否逼近微分方程的问题, 根本不涉及差分方程的解. 而是将微分方程的解代入到差分方程中后所得到的局部截断误差是否随着 $\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta t \rightarrow 0$ 而趋于零? 若局部截断误差趋于零, 则称差分方程和原微分方程是相容的.

以四点显式格式为例, 将 (2.2.7) 写为:

$$L_h[u^{(h)}] = \frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{k} - \frac{U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n}{h^2} = 0, \quad (2.3.1)$$

u 表示微分方程的解, 即有

$$L[u] = \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad (2.3.2)$$

将 u 代入差分方程 (2.3.1), 得局部截断误差

$$T_j^n = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{k} - \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2}. \quad (2.3.3)$$

作 Taylor 级数开展得

$$\begin{aligned} T_j^n &= \left(\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_j^n + \frac{1}{2}k \left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right)_j^n - \frac{1}{12}h^2 \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right)_j^n \\ &\quad + \frac{1}{6}k^2 \left(\frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right)_j^n - \frac{1}{360}h^4 \left(\frac{\partial^6 u}{\partial x^6} \right)_j^n + \cdots, \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

因 u 是微分方程的解, 所以 $\left(\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_j^n = 0$, 因此局部截断误差的主要部分是 $\left(\frac{1}{2}k \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{1}{12}h^2 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right)_j^n$, 所以

$$T_j^n = O(k) + O(h^2) \equiv O(k + h^2),$$

当 $k \rightarrow 0$, $h \rightarrow 0$ 时, $T_j^n \rightarrow 0$. 故四点显式格式 (2.3.1) 与抛物型方程 (2.3.2) 是相容的.

这里顺便指出, 由 (2.3.4)

$$T_j^n = \frac{1}{12}h^2 \left(6 \frac{k}{h^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right)_j^n + O(k^2 + h^4),$$

因 $\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$, 所以 $\frac{\partial^2}{\partial t^2} = \frac{\partial^4}{\partial x^4}$. 若取 $6 \frac{k}{h^2} = 1$, 则即 $r = \frac{k}{h^2} = \frac{1}{6}$, 则

$$T_j^n = O(k^2 + h^4). \quad (2.3.5)$$