

偏微分方程数值解笔记

Fiddie

2021 年 1 月 18 日

Contents

1	有限差分方法	5
1.1	初边值问题基本实现过程	5
1.1.1	定义	5
1.1.2	计算流程	7
1.1.3	推广: 纯初值问题	7
1.1.4	推广: 周期初值问题	8
2	线性差分方程的基本格式	10
2.1	预备知识	10
2.1.1	差分格式的描述方式	10
2.1.2	加密路径	11
2.2	相容性	12
2.2.1	逐点相容性	12
2.2.2	整体相容性	13
2.2.3	两个相容性概念的联系	14
2.2.4	小结	16
2.2.5	导数的离散方法	16
2.3	稳定性	19
2.4	Fourier方法	23
2.5	收敛性	27
3	热传导方程其他格式	31
3.1	加权平均格式	31
3.2	三层格式	32
3.2.1	三层格式 L^2 模稳定性分析方法	32
3.2.2	其他格式	34
3.2.3	三层格式的数值启动	35
3.3	计算效率的提升	35
3.3.1	时间步长的轮替策略	35
3.3.2	显隐交替	36
3.3.3	Saul'ev格式	37
4	一维扩散方程	40
4.1	光滑系数的线性扩散方程	40
4.1.1	非守恒型扩散方程	40
4.1.2	守恒型扩散方程	42
4.2	稳定性分析方法	44
4.2.1	冻结系数方法	44
4.2.2	能量方法	45
4.3	间断系数的扩散方程	47
4.4	极坐标下的热传导方程	48
4.4.1	差商离散导数	48
4.4.2	积分插值法	49

4.5	非线性扩散方程	51
4.5.1	简单的差分格式	51
4.5.2	局部线性化技术	52
4.5.3	外推技术	53
4.6	高维扩散方程	53
4.7	一维导数边界条件	56
4.7.1	单侧离散方式	56
4.7.2	双侧离散方式	58
4.8	高维扩散方程的边界条件	59
4.8.1	矩形区域	60
4.8.2	任意区域	62
4.8.3	本质边界条件的离散	62
4.8.4	自然边界条件的离散	63
4.9	ADI方法与LOD方法	65
4.9.1	Peaceman-Rachford格式	65
4.9.2	Douglas格式	66
4.9.3	三维ADI格式	66
4.9.4	LOD方法	67
5	对流方程	68
5.1	对流方程的特征线	68
5.2	基本格式	69
5.2.1	中心差商显格式与迎风格式	69
5.2.2	Lax-Wendroff格式	70
5.3	CFL条件	71
5.4	其他著名格式	72
5.4.1	Lax-Friedrichs格式	72
5.4.2	蛙跳格式	73
5.4.3	盒子格式	73
5.5	几种格式的数值表现	74
5.6	线性常系数差分格式	75
5.6.1	相容性	75
5.6.2	单调格式与数值振荡	76
5.6.3	数值耗散与数值色散	77
5.7	线性变系数对流方程	79
5.7.1	系数冻结法与时间Taylor法	80
5.7.2	稳定性分析方法	81
5.8	一阶双曲型方程组	82
5.9	波动方程	84
5.9.1	直接离散方式	84
5.9.2	间接离散方式	85
5.10	高维对流方程	88
5.10.1	守恒律构造方法	90

6 守恒律方程	91
6.1 守恒律方程理论	91
6.1.1 激波的形成	92
6.1.2 弱解	94
6.1.3 RH条件	97
6.1.4 熵条件	98
6.1.5 例题	99
6.2 守恒型差分格式	100
6.2.1 基于光滑解的格式构造	100
6.2.2 基于守恒方程的数值格式	101
6.2.3 守恒律方程组	101
6.2.4 数值格式的健壮性	103
6.3 有限体积法	104
6.3.1 基本思想	104
6.3.2 线性问题的有限体积格式	105
6.3.3 非线性问题的有限体积格式	105
6.3.4 Godunov方法	107

第1章 有限差分方法

设 $T > 0$ 是给定的终止时刻, 考虑一维热传导方程的边值问题(HD)

$$u_t = au_{xx} + f(x, t), (x, t) \in (0, 1) \times (0, T],$$

其中扩散系数 $a > 0$ 是给定常数, $f(x, t)$ 是已知源项. 相应的定解条件是初值

$$u(x, 0) = u_0(x), x \in [0, 1],$$

和边值

$$u(0, t) = \phi_0(t), u(1, t) = \phi_1(t), t \in (0, T],$$

其中 $u_0(x), \phi_0(t), \phi_1(t)$ 是已知函数.

模型问题(HD)是适定的, 即真解 $u(x, t)$ 唯一存在, 连续依赖于定解数据, 在适当的条件下, 真解充分光滑的, 其任意阶导数都是连续有界的.

模型问题的真解可以用公式准确表达, 比如分离变量法、Duhamel原理. 但是推导过程繁琐, 公式通常是级数或者卷积, 不适合大量位置的函数值计算; 扩散系数是常数, 无法推广.

常用的简单、快捷、高效的数值方法:

- 有限差分方法(FDM, 主要内容)
- 有限体积方法(FVM)
- 有限元方法(FEM)
- 谱方法
-

§ 1.1 初边值问题基本实现过程

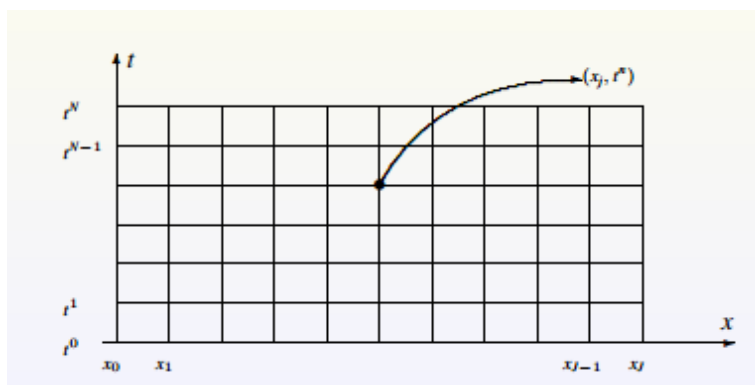
1.1.1 定义

一、计算区域——离散网格.

通常采用最简单的矩形结构.

$$T_{\Delta x, \Delta t} = \{(x_j, t^n) : x_j = j\Delta x, t^n = n\Delta t\}_{j=0:J}^{n=0:N}.$$

上面只有有限个点, n 为时间标号, j 为空间标号. $N = \frac{T}{\Delta t}$, $J = \frac{1}{\Delta x}$, 其中 Δt 为时间步长, Δx 为空间步长.



二、微分方程离散化为差分方程, 即导数离散为差商(差商代替导数【核心】).

热传导方程在网格点 (x_j, t^n) 上精确成立, 有

$$\frac{[u]_j^{n+1} - [u]_j^n}{\Delta t} - a \frac{[u]_{j+1}^n - 2[u]_j^n + [u]_{j-1}^n}{(\Delta x)^2} = f_j^n + O((\Delta x)^2 + \Delta x).$$

其中 $f_j^n = f(x_j, t^n)$ 是已知信息. $[u]_j^n = u(x_j, t^n)$ 是真解信息. 我们来验证上面式子的正确性. 如果设 u 充分光滑, 那么

$$[u]_j^{n+1} - [u]_j^n = \Delta t [u_t]_j^n + O(\Delta t)^2.$$

即一阶逼近

$$\frac{[u]_j^{n+1} - [u]_j^n}{\Delta t} = [u_t]_j^n + O(\Delta t).$$

关于 x 展开:

$$\begin{aligned} [u]_{j+1}^n &= [u]_j^n + \Delta x [u_x]_j^n + \frac{1}{2}(\Delta x)^2 [u_{xx}]_j^n + \frac{1}{6}(\Delta x)^3 [u_{xxx}]_j^n + O(\Delta x^4) \\ -2[u]_j^n &= -2[u]_j^n \\ [u]_{j-1}^n &= [u]_j^n - \Delta x [u_x]_j^n + \frac{1}{2}(\Delta x)^2 [u_{xx}]_j^n - \frac{1}{6}(\Delta x)^3 [u_{xxx}]_j^n + O(\Delta x^4) \end{aligned}$$

相加可得 $[u]_{j+1}^n - 2[u]_j^n + [u]_{j-1}^n = (\Delta x)^2 [u_{xx}]_j^n + O(\Delta x^4)$.

把无穷小量略去, 用数值解来代替真解, 得到热传导方程的差分方程

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} - a \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2} = f_j^n.$$

它的等价变形为

$$\Delta_t u_j^n = \mu a \delta_x^2 u_j^n + \Delta t f_j^n.$$

其中, $\Delta_t u_j^n = u_j^n - u_j^{n-1}$ 是时间方向的一阶向前差分, $\mu = \Delta t / (\Delta x)^2$ 是网比. $\delta_x^2 u_j^n = u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n$ 是空间方向的二阶中心差分.

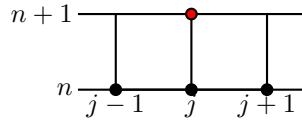
三、定解条件的离散, 相对简单, 只需要在网格点直接赋值即可.

在前面, $[u]_j^n$ 是真解, u_j^n 是数值解. 把数值初值定义为

$$u_j^0 = u_0(x_j), j = 0 : J,$$

数值边值定义为

$$u_0^n = \phi_0(t^n), u_J^n = \phi_1(t^n), n = 1 : N.$$



前面的全部差分方程汇总起来可以得到模型问题的**全显格式**(fully explicit scheme), 利用递推式可以把所有的 u_j^n 都求出来, 不需要用其他工具.

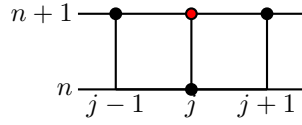
注: 网格点个数=差分方程的个数. 初值的设置也属于差分方程! 初值有 $J+1$ 个差分方程, 边界条件有 $2(N+1)$ 个差分方程, PDE离散有 $N(J-1)$ 个差分方程, 去掉下方两个角点的重复定义, 一共有 $(N+1)(J+1)$ 个差分方程.

思考: 若边值条件与初值条件在下方角点冲突(不相等), 会出现什么问题? 我们该怎么做?

(思考)能否构造**全隐格式**? 如果把全显格式的时间方向改成一阶向后差分, 可以得到全隐格式(fully implicit scheme).

$$\Delta_t u_j^n = \mu a \delta_x^2 u_j^{n+1} + \Delta t f_j^{n+1}, j = 1 : J-1, n = 0 : N-1. \quad (1.1)$$

数值初边值条件同上. 它与前面有什么区别? 需要耦合求解, 要用到其他工具.



1.1.2 计算流程

一种想法是时空一起求解(未知数很多, 很麻烦), 考虑用逐层求解(n : 已知相关信息, $n+1$: 如何求 u_j^{n+1} ?)

全显格式的实现是显而易见的, 全隐格式需要耦合求解, 每次时间推进对应一个线性方程组

$$\mathbb{B}_1 u^{n+1} = \mathbb{B}_0 u^n + \Delta t F^n, n = 0 : N-1,$$

其中, $u^n = (u_1^n, u_2^n, \dots, u_{J-1}^n)^T$ 是数值解在相应时间层的计算信息(待解的! 注意前一时间层信息都是已知的), 而

$$F^n = \left(f_1^{n+1} + \frac{\mu a}{\Delta t} \phi_0^{n+1}, f_2^{n+1}, \dots, f_{J-1}^{n+1} + \frac{\mu a}{\Delta t} \phi_1^{n+1} \right)^T$$

是由定解条件给出的计算信息(u_0^n, u_J^n 已知, 所以有两个尾巴), \mathbb{B}_1 与 \mathbb{B}_0 分别是左端矩阵和右端矩阵, 它们的规模与 J 有关. 把全隐格式(1.1)展开来写, 得到

$$u_j^{n+1} - u_j^n = \mu a (u_{j-1}^n - 2u_j^{n+1} + u_{j+1}^n) + \Delta t f_j^{n+1},$$

整理得

$$u_{j-1}^{n+1} \cdot (-2\mu a) + u_j^{n+1} (1 + 2\mu a) + u_{j+1}^n (-2\mu a) = u_j^n + \Delta t f_j^{n+1},$$

那么上述 \mathbb{B}_0 是单位矩阵, 而

$$\mathbb{B}_1 = \begin{pmatrix} 1+2\mu a & -\mu a & & & \\ -\mu a & 1+2\mu a & -\mu a & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \cdots & \cdots & -\mu a \\ & & & -\mu a & 1+2\mu a \end{pmatrix} = \text{tridiag}(-\mu a, 1+2\mu a, -\mu a).$$

是三对角矩阵, 用Thomas追赶法求解. 因此, 每次时间推进的计算复杂度: 全隐格式是 $O(5J)$, 全显格式是 $O(2J)$.

全隐格式的竞争力是CPU时间(用比较少的时间层数可以算出来), 大概是全显格式的 $\frac{1}{2}$. 数值实验表明, 全隐格式的时间步长可以比全显格式大(全显格式如果取得太大的话会很坏)

补充: 数值表现在刚开始会有剧烈抖动(比如初值与边值在角点处冲突), 此时可以采取不用均匀网格点(改为用非均匀或自适应网格), 或者用Fourier变换来处理(Fourier变换就是分离变量法), 或者换一种度量方式(比如 L^2 模度量等等, 不作重点) 数值模拟的主流问题是这些很差的问题. (比如发动机点火、把热水突然间放进冷水中)

注: 要注意前面“数值边值”的设置的不包括0, 这是最粗暴的解决冲突的方式.

在数值误差降低之前, 数值误差有个清晰的抖动和增加过程. 产生这种现象的主要原因是, 初边值冲突造成问题真解光滑程度的下降. 一个非常有趣的数值现象是误差峰值的出现时间似乎是固定的, 它并没有随着网格的加密而改变.

1.1.3 推广: 纯初值问题

考虑整个数轴上的偏微分方程定解问题

$$\begin{aligned} u_t &= a u_{xx} + f(x, t), x \in \mathbb{R}, t \in (0, T], \\ u(x, 0) &= u_0(x), \quad x \in \mathbb{R}. \end{aligned}$$

若初值 $u_0(x) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ 是局部平方可积的**速降函数**, 即

$$\lim_{x \rightarrow \infty} x u_0(x) = 0$$

简称为模型问题(HI). 在适当的条件下(例如 f 也是速降函数)下, 真解 $u(x, t)$ 存在唯一, 在任意时刻都是局部平方可积的速降函数.

数值离散过程与前面类似, 唯一的区别是空间网格点数有无穷多个. 在等距时空网格 $T_{\Delta x, \Delta t}$ 中, 空间网格点可以定义为

$$x_j = x_0 + j\Delta x, j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

时间网格点依旧是

$$t^n = n\Delta t, n = 0 : N.$$

其中 Δx 是空间步长, $\Delta t = T/N$ 是时间步长, N 是给定正整数.

相应的全显格式与全隐格式分别为

$$\begin{aligned} \Delta_t u_j^n &= \mu a \delta_x^2 u_j^n + \Delta t f_j^n, j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \\ \Delta_t u_j^n &= \mu a \delta_x^2 u_j^{n+1} + \Delta t f_j^{n+1}, j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \end{aligned}$$

格式没有边界条件, 只有初值条件

$$u_j^0 = u_0(x_j), j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

用上面的差分方程来逼近原来PDE.

如何求无穷处的值? 我们只能对区间做截断, 比如截断为 $[-L, L]$, 让这个区间以外的地方都是0(紧支集), 这个 L 就是人工边界, 需要自己确定. 但现在不考虑这个问题, 假设计算是简单可行的, L 足够大即可, 对计算的影响很小.

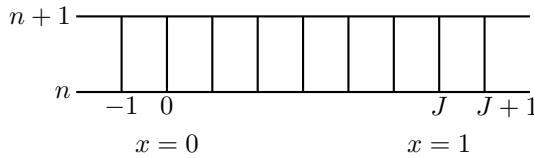
1.1.4 推广: 周期初值问题

同样考虑整个数轴上的偏微分方程定解问题

$$\begin{aligned} u_t &= a u_{xx} + f(x, t), x \in \mathbb{R}, t \in (0, T], \\ u(x, 0) &= u_0(x), \quad x \in \mathbb{R}. \end{aligned}$$

若 $u(x, t) = u(x + 1, t)$, $(x, t) \in \mathbb{R} \times [0, T]$, 则把上面的定解问题叫做周期边值问题(HP).

把离散网格与网格函数在空间方向进行相应的周期延拓, 则周期边值问题可以自动融入到PDE的离散过程. 其中 $x_j = j\Delta x, J = \frac{1}{\Delta x}, j = 0 : J$. 每个点都有差分方程.



数值计算只需要截取一个完整的空间周期. 以全隐格式为例,

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = a \frac{u_{j-1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j+1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} + f_j^{n+1},$$

即

$$\Delta_t u_j^n = \mu a \delta_x^2 u_j^{n+1} + \Delta t f_j^{n+1}, j = 1 : J, n = 0 : N - 1.$$

其初值是 $u_j^0 = u_0(x_j)$ (与前面一样), 当 $j = 0$ 时, 有 $j - 1 = -1$, 当 $j = J$ 时有 $j + 1 = J + 1$, 作周期延拓后, 相应的周期边值条件是

$$u_0^n = u_J^n, u_{J+1}^n = u_1^n, n = 0 : N.$$

把方程写成矩阵形式得 $\mathbb{B}_1 u^{n+1} = \mathbb{B}_0 u^n + \Delta t F^n$, 其中

$$u^n = (u_1^n, u_2^n, \dots, u_J^n)^T, F^n = (f_1^{n+1}, f_2^{n+1}, \dots, f_J^{n+1})^T$$

是未知的数值解和已知通项. \mathbb{B}_0 是 J 阶单位矩阵, 而

$$\mathbb{B}_1 = \begin{pmatrix} 1 + 2\mu a & -\mu a & & & -\mu a \\ -\mu a & 1 + 2\mu a & -\mu a & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & \cdots & \cdots & -\mu a \\ -\mu a & & & & -\mu a & 1 + 2\mu a \end{pmatrix} = \text{ptridiag}(-\mu a, 1 + 2\mu a, -\mu a).$$

是 J 阶循环三对角阵. 利用 Sherman-Morrison 公式 (上学期作业) 与 Thomas 算法, 数值求解仅需 $O(11J)$ 次乘除法运算. (也可以作 LU 分解, $B_1 = LU$, 然后再对 U 作初等变换变成三对角阵)

定理 1.1.1 (Sherman-Morrison) 设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是非奇异矩阵, $u, v \in \mathbb{R}^n$. 若 $1 + v^T A^{-1} u \neq 0$, 则 $A + uv^T$ 非奇异, 且

$$(A + uv^T)^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1} uv^T A^{-1}}{1 + v^T A^{-1} u}.$$

小结:

- **可行性** 是数值计算的前提条件. 差分格式的数值解要存在唯一, 相应的数值实现过程要简单易行 (计算上可实现).
- **可信度** 是数值计算的基本目标. 在数值实践的基础上, 我们还需建立相应的数值概念和严格论证. 至少, 我们要明确下面三个基本问题: (1) 数值格式是否逼近定解问题? 相关的概念有 **相容性** 和 **局部截断误差**. (2) 数值格式是否适合数值计算? 换言之, 舍入误差的积累必须要得到有效的控制. 相关的概念是 **稳定性**. (3) 作为数值计算的最终目标, 数值解是否逼近真解? 相关的概念有 **收敛性** 和 **误差估计**. 我们还可能会追求数值解的完美表现, 例如单调、有界和守恒等真解性质的数值保持.
- **高效性** 也是数值计算的追求目标, 是影响数值格式能否广泛应用的一个主要因素. 数值格式要用最小代价 (数据存储, CPU 时间) 获得最佳的计算效果, 即所谓的 “性价比” 追求.

习题 1 (Week 1)

1. 推导 Sherman-Morrison 公式, 写出周期初值问题的相应算法.

回顾: (1) 网格点分作边界网格点与内部网格点, 也就是说交叉的地方都是网格点. (2) 全显格式 $O(5J)$, 全隐格式 $O(2J)$ 都是令 $f = 0$ 的, (3) 注意初值与边值的 j, n 的取值范围. 定义冲突的情况是常见的, 即 $\phi_0(0) \neq u_0(0)$, PDE 的提法没问题, 但是解不是古典解, 而是弱解. (角点奇异性)

在设计算法时, 需要评价计算效果、格式设计是否理想. 数值讨论: 起点是好解, 目标是坏解 (好坏在于光滑度的问题).

(HD), (HP), (HI) 都可以定义古典格式 (全显、全隐). 前两者区间 $(0, 1)$ 是有界的, 而 (HI) 是纯初值问题, 区间是 $(-\infty, +\infty)$.

① 在适当条件下, 工作效率怎么样?

② $\mu = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ 网格比满足某种条件.

③ 计算效率: 隐式单步 i 显式单步; 隐式 Δt_i 显式 Δt , 则效率上隐式 i 显式.

求解 PDE 的时候先设计格式, 然后评价效果, 比较竞争力.

第2章 线性差分方程的基本格式

§ 2.1 预备知识

定义 2.1.1 (网格函数) 空间网格 $T_{\Delta x} = \{x_j\}_{\forall j}$ 与时间网格 $T_{\Delta t} = \{t^n\}_{\forall n}$ 的笛卡尔乘积构成**时空网格**

$$T_{\Delta x, \Delta t} = \{(x_j, t^n)\}_{\forall j}^{\forall n} = T_{\Delta x} \otimes T_{\Delta t}.$$

这里都是等距网格, 为了简单期间我们默认 $T_{\Delta x, \Delta t}$ 是等距的, 其中 Δt 是时间步长, Δx 是空间步长. 定义在离散网格 $T_{\Delta x, \Delta t}$ 或其子集上的离散函数(指定义域是个离散点集的函数) 通常称为**网格函数**. $(x_j = j\Delta x, t^n = n\Delta t), j = 0, 1, \dots, J, n = 0, 1, \dots$ 叫网格点.

发展型方程通常用逐层推进求解的策略. (即按照时间来推进) 因此任意时刻(尤其是终止时刻)的**空间网格函数**

$$u^n = \{u_j^n\}_{\forall j}, \forall n$$

是备受关注的研究对象.

空间网格函数的度量有两种. ①逐点度量(简单直观的逐点方式); ②离散范数(适合整体方式). 通常用下面的离散范数: (接近于向量范数)

$$\begin{aligned} \|u^n\|_{\infty} &= \|u^n\|_{\infty, \Delta x} = \max_{\forall j} |u_j^n|, \\ \|u^n\|_2 &= \|u^n\|_{2, \Delta x} = \left[\sum_{\forall j} |u_j^n|^2 \Delta x \right]^{1/2} \end{aligned}$$

注: 这三个范数都满足范数的定义, 类比 l^p 空间即可. 与一般范数的区别在于它与网格空间步长有关.

注: 例如在 $[0, 1]$ 区间上, $u_0^n = 0, u_J^n = 0$, 则

$$\|u^n\|_2 = \left[\sum_{j=1}^{J-1} |u_j^n|^2 \Delta x \right]^{1/2} \approx \left(\int_0^1 |u^n(x)|^2 dx \right)^{1/2} = \|u^n(x)\|_{L^2[0,1]}$$

(复合型矩形积分公式), 其中 $u^n(x)$ 是 u^n 在区间 $(0, 1)$ 经过各个点的插值函数.

2.1.1 差分格式的描述方式

(1)简单直观的**局部描述**, 即位于网格点的差分方程, 例如

$$\Delta_t u_j^n = \mu a \delta_x^2 u_j^{n+1} + \Delta t f_j^{n+1}$$

是热传导方程的一个离散逼近. 展开来写就是

$$\begin{aligned} \text{(HD):} \quad & u_j^{n+1} = u_j^n + \mu a \delta_x^2 u_j^n + \Delta t f_j^n \\ & j = 1 : J-1, n = 0 : N-1, t^N = T \\ & u_j^0 = u_0(x_j), j = 0 : J \\ & u_0^n = \phi_0(t^n), n = 1 : N \end{aligned}$$

(上述方程都是“格式”的一部分)

(2)理论严谨的**整体描述**, 即逼近模型问题的完整离散系统

$$\mathbb{B}_1 u^{n+1} = \mathbb{B}_0 u^n + \Delta t G^n, \forall n,$$

其中 Δt 是时间步长, $u^n \equiv \{u_j^n\}_{\forall j}$ 是 t^n 时刻的网格函数, G^n 是给定的网格函数, \mathbb{B}_1 和 \mathbb{B}_0 是网格函数空间到其自身的线性算子. (其实它们可以与时间层数和网格函数有关. 但是若与网格函数有关, 则相应的差分格式是非线性的.)

不妨用整体描述来作为双层格式的抽象定义.

默认 \mathbb{B}_1 是可逆的(要满足可行性), 定义相应的**规范形式**

$$u^{n+1} = \mathbb{B} u^n + \Delta t H^n, \forall n,$$

其中 $\mathbb{B} = \mathbb{B}_1^{-1} \mathbb{B}_0$, $H^n = \mathbb{B}_1^{-1} G^n$. 这里 H^n 可以是显式或隐式. 若两个差分格式的规范形式相同, 那么它们是**没有差别**的.

注: 规范形式是唯一的.

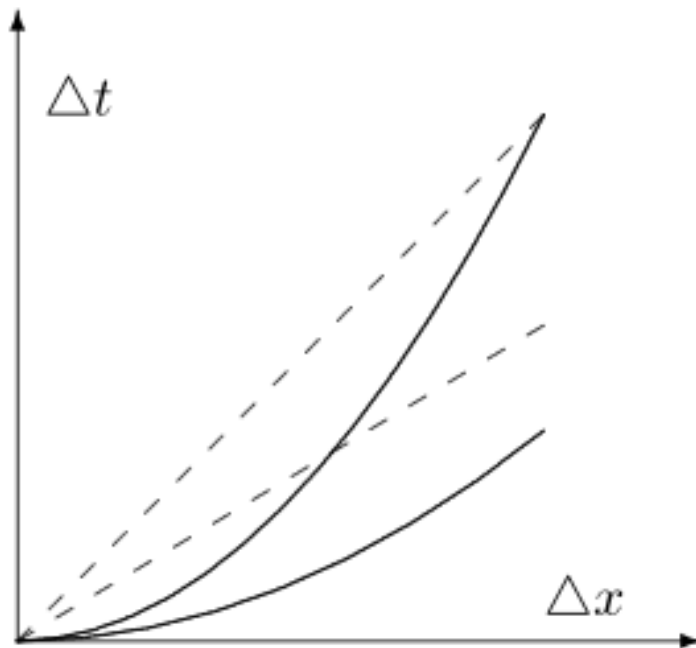
2.1.2 加密路径

严格来讲, 差分格式不是特指某个固定网格的一个离散系统, 是指同网格参数相关的一族离散系统. 在网格的加密过程中, 差分格式的数值现象是重要的研究内容, 事实上, 两个网格参数可以独自趋于零, 但是通常假定它们沿着某种**加密路径**

$$\Delta x = \mathcal{G}(\Delta t)$$

趋于零, 其中 $\mathcal{G}(\cdot)$ 是满足 $\mathcal{G}(0) = 0$ 的连续函数.

下图中的加密路径, 实线表示 $\Delta t/(\Delta x)^2$ 是常数, 虚线表示 $\Delta t/\Delta x$ 是常数.



若某个数值概念(容后介绍的相容性、稳定性和收敛性)对于任意的加密路径都是成立的, 则称这个数值概念是无条件成立的; 否则称其是有条件成立的.

§ 2.2 相容性

2.2.1 逐点相容性

定义平行于ODE, 相当于再阐述一遍, 概念含义是一样的.

离散系统(差分格式) \Rightarrow 连续系统(PDE问题) 是否足够接近?

差分格式的主要离散对象是偏微分方程

$$\mathcal{L}[u] = g.$$

目标是求解网格函数(数值解).

逐点相容性(pointwise consistency)

定义 2.2.1 若差分方程在网格点 (x_j, t^n) 处具有局部描述 $\mathcal{L}_{\Delta x, \Delta t} u_j^n = g_j^n$, 则相应的**局部截断误差 (truncation error)**是

$$\tau_j^n = \mathcal{L}_{\Delta x, \Delta t} [u]_j^n - g_j^n,$$

其中 $[u]$ 是满足偏微分方程 $\mathcal{L}[u] = g$ 的充分光滑函数 (真解) .

例如: $u_t = au_{xx}$, 全显格式 $u_j^{n+1} = u_j^n + \mu a \delta_x^2 u_j^n$ 是个局部描述. 是不是我们想要的局部描述?

定义 2.2.2 当 Δt 和 Δx 趋于零时, 若 $\tau_j^n \rightarrow 0$ (默认指沿着某条加密路径趋于零), 则称差分方程**逐点相容于**偏微分方程(逼近对象).

定义 2.2.3 若存在不可改善的 $m_1, m_2 > 0$, 使得

$$\tau_j^n = O((\Delta x)^{m_1} + (\Delta t)^{m_2})$$

则称差分方程的**局部截断误差阶**是 (m_1, m_2) .

局部截断误差就是数值离散过程中丢弃的无穷小量, 例如:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = a \frac{\delta_x^2 u_j^n}{(\Delta x)^2}$$

对应的局部截断误差是

$$\tau_j^n = O(\Delta t) + O(\Delta x^2).$$

差分方程与其离散对象具有清楚的逐项对应关系. 需要锁定一个逼近对象.

(1)如果逼近对象含 f , 则 $u_j^{n+1} = u_j^n + \mu a \delta_x^2 u_j^n + \Delta t f_j^n$, 两边除以 Δt 得

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = a \frac{\delta_x^2 u_j^n}{(\Delta x)^2} + f_j^n,$$

这里的 f 锁定了一一对应关系. (回顾: 网比 $\mu = \Delta t / (\Delta x)^2$)

(2)如果不含 f , 锁定 $u_t \approx \frac{[u]_j^{n+1} - [u]_j^n}{\Delta t}$, 新方程是

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \mu a \delta_x^2 u_j^n + \Delta t f_j^n,$$

强制出现右边这项, 对应 u_t , 再比较这个差分方程的两端.

上面的过程比较烦, 如果仅关心阶, 简便准则是比较量纲, 如米、秒. 这样相应的局部截断误差阶就是准确的. 例如, $u_t = au_{xx}$ 单位是1/秒, 而 $u_j^{n+1} = u_j^n + \mu a \delta_x^2 u_j^n$ 单位是1, 需要两边除以 Δt 让单位变成1/秒.

回到基本形式

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = a \frac{\delta_x^2 u_j^n}{(\Delta x)^2}$$

定义

$$\tau_j^n = \frac{1}{\Delta t} ([u]_j^{n+1} - [u]_j^n - \mu a \delta_x^2 [u]_j^n - \Delta t f_j^n)$$

(精确解减去数值解) 其中 $[u]$ 是真解, 满足 $u_t = au_{xx}$.

局部截断误差阶与采用的推导过程无关, 在任意(单个或多个)位置执行**Taylor展开**, 最终的理论结果是一样的.

作Taylor展开:

$$\begin{aligned} [u]_j^{n+1} &= [u]_j^n + \Delta t [u_t]_j^n + O(\Delta t)^2 \\ \delta_x^2 [u]_j^n &= [u]_{j+1}^n - 2[u]_j^n + [u]_{j-1}^n \\ &= [u]_j^n + \Delta x [u_x]_j^n + \frac{1}{2}(\Delta x)^2 [u_{xx}]_j^n + \frac{1}{6}(\Delta x)^3 [u_{xxx}]_j^n + O(\Delta x^4) \\ &= (\Delta x)^2 [u_{xx}]_j^n + O(\Delta x)^4. \end{aligned}$$

代入定义, $\mu = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$ 是常数, 于是

$$\begin{aligned} \tau_j^n &= \frac{1}{\Delta t} [\Delta t [u_t]_j^n + O(\Delta t^2) - \mu a (\Delta x)^2 [u_{xx}]_j^n + O(\Delta x^4) - \Delta t f_j^n] \\ &= \frac{[u_t]_j^n - a [u_{xx}]_j^n - f(x_j, t^n)}{1} + O(\Delta t + \Delta x^2) \\ &= O(\Delta x^2 + \Delta t). \end{aligned}$$

全显格式都是无条件具有(2,1)阶局部截断误差.

注: 总结: 基本步骤是①定义清楚, ②Taylor展开, ③利用PDE消去低次项. 这样得到的阶是最高的, 不可改善.

作业: 在新的展开位置 $(x_j + \theta \Delta x, t^n + \eta \Delta t)$ 处作展开, 判定 τ_j^n 的阶数? (沿用前面的定义与Taylor展开) 这个计算量很大, 但最终结果不变.

注: 根据作业, 展开位置的选取很重要, 可以简化计算过程.

作业写法: 画个表格,

【TODO: 表格】

要描述0是怎么消去的过程.

单个点的差分方程一般不作讨论, 太简单了. 例如: (HP)问题中, 初值 $u_j^0 = u_0(x_j)$, $\tau_j^n \equiv 0$; 边值 $u_0^n = \phi_0(t^n) \equiv \phi_0^n$, $\tau_j^n \equiv 0$. 一般考虑至少有两个点的, 如果只有一个点就直接赋值.

如果定义 $u_j^0 = \frac{1}{2}[u_0(x_{j+1}) + u_0(x_{j-1})]$, $j = 1 : J - 1$, 是否有 $\tau_j^n \equiv 0$? (思考题)

2.2.2 整体相容性

对于每个差分方程, 其局部截断误差可能对应不同的定义格式($\tau_j^n = O(\cdot, \cdot)$ 互不相同), 或者具有明显不同的表现, 甚至因找不到清楚的单独逼近对象而难以定义. 所以引入整体相容性(norm consistency)的概念.

定义 2.2.4 考虑规范形式

$$u^{n+1} = \mathbb{B}u^n + \Delta t H^n, \forall n.$$

若存在网格函数 $\Phi^n = \{\Phi_j^n\}_{\forall j}$, 使得

$$[u]^{n+1} = \mathbb{B}[u]^n + \Delta t H^n + \Delta t \Phi^n$$

其中 $[u]$ 是满足偏微分方程定解问题的充分光滑函数, 则称 Φ^n 是差分格式的**局部截断误差(网格函数)**.

定义 2.2.5 设 $\|\cdot\|$ 是给定的离散范数(相当于一个度量), 当 Δx 与 Δt 趋于零时, 若有

$$\|\Phi^n\| = \|\Phi^n\|_{\Delta x} \rightarrow 0, \forall n,$$

则称差分格式

$$\mathbb{B}_1 u^{n+1} = \mathbb{B}_0 u^n + \Delta t G^n, \forall n$$

按 $\|\cdot\|$ **整体相容** 于偏微分方程定解问题.

定义 2.2.6 若存在不可改善的两个正数 m_1 和 m_2 , 使得

$$\|\Phi^n\| = O((\Delta x)^{m_1} + (\Delta t)^{m_2}), \forall n,$$

则称差分格式

$$\mathbb{B}_1 u^{n+1} = \mathbb{B}_0 u^n + \Delta t G^n, \forall n$$

的**相容阶**是 (m_1, m_2) .

2.2.3 两个相容性概念的联系

考虑(HD)全隐格式, $\phi_0 \equiv \phi_1 = 0$, $\mathbb{B}_0 = I$ 是单位矩阵, \mathbb{B}_1 是三对角矩阵(定义同前), $\mu = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$, 这里有 j 个方程

$$-\mu a u_{j-1}^{n+1} + (1 + 2\mu a) u_j^{n+1} - \mu a u_{j+1}^{n+1} = u_j^n + \Delta t f_j^{n+1}$$

逐点相容分析可知

$$-\mu a [u]_{j-1}^{n+1} + (1 + 2\mu a) [u]_j^{n+1} - \mu a [u]_{j+1}^{n+1} = [u]_j^n + \Delta t f_j^{n+1} + \tau_j^n \Delta t,$$

其中 $\tau_j^n = O(\Delta t + \Delta x^2)$. 拼装出来以后

$$\tilde{\Phi}^n = (\tau_1^n, \dots, \tau_{J-1}^n),$$

问题的局部截断误差网格函数到底是谁? 如果按照上面这样写就是

$$\mathbb{B}_1 [u]^{n+1} = \mathbb{B}_0 [u]^n + \Delta t F^n + \Delta t \tilde{\Phi}^n.$$

定义要求规范形式, 因此

$$\Phi^n = \mathbb{B}_1^{-1} \tilde{\Phi}^n = \mathbb{B}_1^{-1} (\tau_1^n, \dots, \tau_{J-1}^n).$$

【换一种描述逐点组装】: 假设差分格式

$$\mathbb{B}_1 u^{n+1} = \mathbb{B}_0 u^n + \Delta t G^n, \forall n$$

具有规范形式

$$u^{n+1} = \mathbb{B} u^n + \Delta t H^n, \forall n,$$

使得

$$\frac{1}{\Delta t} \mathbb{B}_1 u^{n+1} = \frac{1}{\Delta t} \mathbb{B}_0 u^n + G^n$$

的第 j 个(或对应网格点 (x_j, t^n) 处的)差分方程恰好就是推导局部截断误差 τ_j^n 所需的局部描述, 换言之,

$$\frac{1}{\Delta t} \mathbb{B}_1 [u]^{n+1} - \frac{1}{\Delta t} \mathbb{B}_0 [u]^n - G^n = \tau^n,$$

其中 $\tau^n \equiv \{\tau_j^n\}_{\forall j}$. 由定义可知, 整体相容性的局部截断误差网格函数是

$$\Phi^n = \mathbb{B}_1^{-1} \tau^n.$$

注: 逐点组装是判断两种相容性必须经过的步骤.

由上可得 $\|\Phi^n\| \leq \|\mathbb{B}_1^{-1}\| \|\tau^n\|$, 其中

$$\|\mathbb{B}_1^{-1}\| = \sup_{w \neq 0} \frac{\|\mathbb{B}_1^{-1}w\|}{\|w\|}$$

是算子范数, 是矩阵范数的一种. 全隐格式每点是(2,1)阶的, 那整体也是(2,1)阶吗? 如果要证明整体相容阶与逐点相容阶相同, 需要验证算子范数 $\|\mathbb{B}_1^{-1}\|$ 关于空间网格有一致有界性. 即当 Δx 适当小时, 有 $\|\mathbb{B}_1^{-1}\| \leq M$, 且 $M > 0$ 与 Δx 无关. 这是隐格式与显格式的明显区别!

我们考虑简单的问题(HI), 求在最大模度量下, 全隐格式的整体相容性结果. 设 $f \equiv 0$, $\mathbb{B}_1 = \text{tridiag}(-\mu a, 1 + 2\mu a, \mu a)$ (上下无界的矩阵, 无穷阶)

设 \mathbb{E}^s 是移位算子, 对任意的网格函数 $w = \{w_j\}_{\forall j}$, 有

$$\mathbb{E}^s w_j = w_{j+s}, \forall j, s = 0, \pm 1.$$

那么 \mathbb{B}_1 可以简单表示为

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_1 w_j^n &= -\mu a w_{j+1}^n + (1 + 2\mu a) w_j^n - \mu a w_{j-1}^n \\ &= ((1 + 2\mu a) \mathbb{E}^0 - \mu a [\mathbb{E} + \mathbb{E}^{-1}]) w_j^n, \end{aligned}$$

由于 $\|\mathbb{E}^t w\|_\infty = \|w\|_\infty$ 恒成立, 则由三角不等式可知

$$\begin{aligned} \|\mathbb{B}_1 w\|_\infty &\geq \|-\mu a \mathbb{E}^{-1} w + (1 + 2\mu a) \mathbb{E}^0 w - \mu a \mathbb{E}^1 w\|_\infty \\ &\geq (1 + 2\mu a) \|w\|_\infty - \mu a (\|w\|_\infty + \|w\|_\infty) \\ &= \|w\|_\infty, \forall w. \end{aligned}$$

因此

$$\begin{aligned} \|\mathbb{B}_1^{-1}\|_\infty &= \sup_{w \neq 0} \frac{\|\mathbb{B}_1^{-1}w\|_\infty}{\|w\|_\infty} = \sup_{w \neq 0} \frac{\|w\|_\infty}{\|\mathbb{B}_1 w\|_\infty} (\text{让 } w \rightarrow \mathbb{B}_1^{-1}w) \\ &\leq 1. \end{aligned}$$

因此, 在最大模度量下, 模型问题(HI)的全隐格式也有(2,1)阶整体相容性.

作业: (HP),(HD)问题是否也对? (边界都等于0) 怎么判断 $\|\mathbb{B}^{-1}\|$ 等同于矩阵范数, 它的无穷范数与 L^2 范数与网格点无关(一致有界)? 有点难度. 暂时做不了的话看看以后能不能解决. 要用到数值分析的方法.

注: 严格来讲整体相容性比较难证明, 但数值经验表明大多数情况下通常一致有界性都是满足的, 即局部相容阶与整体相容阶相同. 在后面将忽略两种相容性概念的细微差别, 直接用局部相容性概念来作为基本的分析工具.

作业1: 求解PDE: $v_t = av_{xx}$ 的下面差分格式相容阶是(4,1)的. 其中 $r = \frac{a\Delta t}{(\Delta x)^2}$.

$$u_j^{n+1} = u_j^n + r \left(-\frac{1}{12} u_{j-2}^n + \frac{4}{3} u_{j-1}^n - \frac{5}{2} u_j^n + \frac{4}{3} u_{j+1}^n - \frac{1}{12} u_{j+2}^n \right).$$

作业2: 证明输运问题 $v_t + av_x = 0$ 的差分格式的局部截断误差是 $O(\Delta t^2 + \Delta x^4)$. 其中 $R = \frac{a\Delta t}{\Delta x}$, $\delta_0 u_k = u_{k+1} - u_{k-1}$.

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{R}{2} \delta_0 u_j^n + \frac{R}{12} \delta_0^2 u_j^n + \frac{R^2}{2} \left(\frac{4}{3} + R^2 \right) \delta_0^2 u_j^n - \frac{R^2}{8} \left(\frac{1}{3} + R^2 \right) \delta_0^2 u_k^n.$$

2.2.4 小结

相容性概念: ①逐点相容性; ②整体相容性=① $\oplus \|B_1^{-1}\|_\infty \leq M$ (一致有界). 一般情况下我们用①来代替②.

本节作业: (1) Taylor展开的位置不影响相容阶结论. (2) (HP), (HD)问题的左端算子的逆是否一致有界? (主要是看无穷范数) (3) 习题2.4. (在我们的书中是2.7)

2.2.5 导数的离散方法

像上面习题第(1)题的各项系数是怎么确定的呢? 事实上, 核心思想是用差商来离散导数, 具体方法有待定系数法、函数逼近法、符号演算方法.

在前面构造差分格式的时候把导数用差商形式来表示. 主要设计策略有: 差商离散方法、积分插值方法. 下面介绍差商离散方法. 有三种:

一、待定系数法

设 D 是微分算子, 把 $p(x)$ 的 m 阶导数记为 $D^m p(x)$. 设离散模板 $\{x_{j+s}\}_{s=-l:r}$ 是等距的, 即 l, r 是非负整数, 且 $x_{j+s} = x_j + s\Delta x, s = -l:r$. 设 $x^* = x_j + \theta\Delta x$ 是离散焦点, $\theta \in [0, 1)$, 若 $p(x)$ 足够光滑, 确定差商公式

$$D^m p(x_*) = \sum_{s=-l}^r \alpha_s p(x_{j+s}) + O((\Delta x)^\sigma)$$

其中 α_s 是差商组合系数, $\sigma > 0$ 是相容阶.

以离散焦点 x_* 为展开中心, 作每点函数值的Taylor展开:

$$\begin{aligned} D^m p(x_*) &= \sum_{s=-l}^r \alpha_s \sum_{k=0}^{\infty} \frac{[(j+s)\Delta x - (j+\theta)\Delta x]^k}{k!} D^k p(x_*) + O(\cdots) \\ &= \sum_k \left[\sum_s \alpha_s \frac{(s-\theta)^k}{k!} \right] (\Delta x)^k D^k p(x_*) + O(\cdots) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \beta_k (\Delta x)^k D^k p(x_*) + O(\cdots) \end{aligned}$$

则

$$\beta_0 = \cdots = \beta_{m-1} = 0, \beta_m = \frac{1}{(\Delta x)^m} \quad (*)$$

其余项对应无穷小量 $O(\cdots)$, (*)构成了线性方程组.

情况1: 解出 $\alpha_{-l}, \cdots, \alpha_r$ ($l+r+1$ 个系数), 进一步计算后续的 β_k , 验证相容阶是

$$\sigma = \min\{k : k > m, \beta_k \neq 0\} - m.$$

情况2: 无解, 则 $l+r$ 需要变大(离散模板宽度不足).

例 2.2.1 设三个网格点 x_{j-1}, x_j, x_{j+1} 等距分布, 相应的间距是 Δx , 建立二阶导数 $p_{xx}(x_j)$ 的差商离散, 使得相容阶尽可能高.

	$[p]_j$	$[Dp]_j$	$[D^2p]_j$	$[D^3p]_j$	$[D^4p]_j$
$[p]_{j-1}$	1	$-\Delta x$	$\frac{1}{2}\Delta x^2$	$-\frac{1}{6}(\Delta x)^3$	$\frac{1}{24}(\Delta x)^4$
$[p]_j$	1				
$[p]_{j+1}$	1	Δx	$\frac{1}{2}\Delta x^2$	$\frac{1}{6}(\Delta x)^3$	$\frac{1}{24}(\Delta x)^4$

$\theta = 0, l = r = 1$, 经过计算可知

$$\beta_0 = \alpha_{-1} + \alpha_0 + \alpha_1,$$

$$\beta_1 = -\alpha_{-1} + \alpha_1,$$

$$\beta_2 = (\alpha_{-1} + \alpha_1)/2,$$

$$\beta_3 = (-\alpha_{-1} + \alpha_1)/6,$$

$$\beta_4 = (\alpha_{-1} + \alpha_1)/24.$$

令 $m = 2$, 则 $\beta_0 = \beta_1 = 0, \beta_2 = 1$, 解得

$$\alpha_{-1} = \alpha_1 = \frac{1}{(\Delta x)^2}, \alpha_0 = -\frac{2}{(\Delta x)^2}.$$

所以答案是二阶中心差商, 即

$$p_{xx}(x_j) \approx \frac{\delta_x^2[p]_j}{(\Delta x)^2}.$$

进一步验证 $\beta_3 = 0, \beta_4 \neq 0$, 那么它具有 $O((\Delta x)^2)$ 的逼近程度.

二、函数逼近理论

可以用Lagrange多项式(Newton多项式)、Hermite多项式、样条插值、最佳逼近多项式逼近导数.

在局部区域(离散模板的覆盖区域)上, 构造 $p(x)$ 的近似函数 $p_{\Delta x}(x)$; 函数逼近理论表明, $p(x)$ 和 $p_{\Delta x}(x)$ 的导函数 $Dp, Dp_{\Delta x}$ 也有近似关系, 而且 $Dp, Dp_{\Delta x}$ 都可被计算出来. (用有限个点值表示出来)

例 2.2.2 设三个网格点 x_{j-1}, x_j, x_{j+1} 等距分布, 利用局部的抛物线插值过程, 给出 $p_{xx}(x_j)$ 的有限差商函数.

解: $p(x)$ 在三个网格点上插值而成的抛物函数是

$$p_{\Delta x}(x) = p(x_j) + p[x_j, x_{j+1}](x - x_j) + p[x_{j-1}, x_j, x_{j+1}](x - x_j)(x - x_{j+1}),$$

其中 $p[x_j, x_{j+1}], p[x_{j-1}, x_j, x_{j+1}]$ 分别是一阶和二阶Newton差商

$$\begin{aligned} p[x_j, x_{j+1}] &= \frac{[p]_{j+1} - [p]_j}{\Delta x}, \\ p[x_{j-1}, x_j, x_{j+1}] &= \frac{p[x_j, x_{j+1}] - p[x_j, x_{j-1}]}{\Delta x} \\ &= \frac{([p]_{j+1} - [p]_j) - ([p]_j - [p]_{j-1})}{2(\Delta x)^2} \\ &= \frac{1}{2(\Delta x)^2} \delta_x^2[p]_j. \end{aligned}$$

(这里与教科书说法不同, 与二阶差商的定义有关)因此

$$p_{xx}(x_j) \approx p''_{\Delta x}(x_j) = 2p[x_{j-1}, x_j, x_{j+1}] = \frac{\delta_x^2[p]_j}{(\Delta x)^2}$$

三、符号演算方法(实用)

设 h 是给定的移位距离, 移位算子

$$E^s p(s) = p(x + sh)$$

则

$$E^0 = I, E = E^1, E^{a+b} = E^a \cdot E^b, \forall a, b \in \mathbb{R}.$$

反向移位算子 E^{-1} 是 E 的逆.

各种差分离散算子都可以用移位算子表示, 例如

- 一阶向前差分算子: $\Delta_+ = \Delta = E - I$.

- 一阶向后差分算子: $\Delta_- = I - E^{-1}$.
- 一步中心差分算子: $\Delta_0 = E - E^{-1}$.
- 半步中心差分算子: $\delta = E^{1/2} - E^{-1/2}$.
- 二阶中心差分算子: $\delta^2 = \delta \cdot \delta = E - 2I + E^{-1}$.

符号演算技巧: 把算子符号记作变量, 算子运算变成函数运算.

注: 差分算子的各个系数加起来是0, 平均算子 $\mu p(x) = \frac{1}{2}(p(x+h) + p(x-h))$ 不能用差分算子表示.

例 2.2.3 建立微分算子 D 的差商导数, 用向前差分来表示.

解: 由Taylor展开, 可知 E 可以用差商表示为:

$$\begin{aligned} p(x+h) &= Ep(x) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{h^k}{k!} D^k p(x) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (hD)^k p(x), \forall p(x). \\ \Rightarrow E &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (hD)^k = e^{hD}. \end{aligned}$$

由 $E = I + \Delta$ 可知 $D = \frac{1}{h} \ln E = \frac{1}{h} \ln(I + \Delta)$. 由 $\ln(1+z)$ 的Taylor展开, 且 $\Delta^m = O(h^m)$, 则

$$\begin{aligned} D &= \frac{1}{h} \Delta + O(h), \\ D &= \frac{1}{h} \left(\Delta - \frac{1}{2} \Delta^2 \right) + O(h^2). \end{aligned}$$

如果写出系数, 则展开到 $O(h^2)$ 得到的结果如下:

	x	$x+h$	$x+2h$
Δ	-1	1	
$-(1/2)\Delta^2$	-1/2	1	-1/2
总系数	-3/2	2	-1/2

总系数加起来是0.

另外, 多数不用多项式展开, 改用 $\ln(1+z)$ 的有理逼近技术 $\frac{P_m(x)}{Q_n(x)}$ 可得

$$D = \frac{1}{h} \frac{\Delta}{1 + \Delta/2} + O(h^2)$$

其中除法对应左逆操作.

注: 有理逼近 $\frac{P_m(x)}{Q_n(x)}$ 可以变成 $R_{m+n}(x)$ 的效果. 教科书有补充.

作业: 利用函数 $\sinh^{-1}(z/2)$ 的Taylor展开式(有理逼近公式), 证明下面的函数逼近公式(选一个), Taylor公式怎么得到的最好也写一下.(查书还是自己推的)

$$\begin{aligned} D &= \frac{1}{h} \left[\delta - \frac{1}{24} \delta^3 + \frac{3}{640} \delta^5 \right] + O(h^6) \\ D^2 &= \frac{1}{h^2} \left[\delta^2 - \frac{1}{12} \delta^4 + \frac{1}{90} \delta^6 \right] + O(h^6) \\ D &= \frac{1}{2h} \frac{\Delta_0}{1 + \delta^2/6} + O(h^4), \\ D^2 &= \frac{1}{h^2} \frac{\delta^2}{1 + \delta^2/12} + O(h^4). \end{aligned}$$

注：有时候不知道一个格式相容阶是多少，可以把指数函数 e^{ikx} 来快速验证，例如

$$\Delta e^{ikx} = e^{ikx}[ikh + O(k^2h^2)] = hDe^{ikx} + O(k^2h^2).$$

于是向前差商 Δ/h 是一阶导数 D 的一阶相容. 这种算法只是对导数离散去做. 涉及到关于 t 的时间导数与关于 x 的空间导数同时出现用这种方法不是很有效.

§ 2.3 稳定性

基于向后误差分析理论, 舍入误差的积累可以视为定解数据发生扰动后的精确计算, 考虑初值为零的全显格式

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \mu \delta_x^2 u_j^n$$

显然准确的数值解是处处为零的网格函数, 假设初值仅仅在零点产生扰动, 其他点保持不变, 即

$$u_j^0 = 0, j \neq 0; u_0^0 = \varepsilon \neq 0$$

取网比 $\mu = 1/2$ 与 $\mu = 1$, 初始扰动的演变过程是怎样的?

(1) $\mu = 1/2$ 时,

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{1}{2}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) = \frac{1}{2}(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n),$$

得到的结果如下:

n	\cdots	x_{-3}	x_{-2}	x_{-1}	x_0	x_1	x_2	x_3	\cdots
0					ε				
1				$\frac{1}{2}\varepsilon$		$\frac{1}{2}\varepsilon$			
2			$\frac{1}{4}\varepsilon$		$\frac{1}{2}\varepsilon$		$\frac{1}{4}\varepsilon$		
3		$\frac{1}{8}\varepsilon$		$\frac{3}{8}\varepsilon$		$\frac{3}{8}\varepsilon$		$\frac{1}{8}\varepsilon$	
4	$\frac{1}{16}\varepsilon$		$\frac{1}{4}\varepsilon$		$\frac{3}{8}\varepsilon$		$\frac{1}{4}\varepsilon$		$\frac{1}{16}\varepsilon$

误差是越来越小的.

(2)如果希望算得快一点, $\mu = 1$ 时, 得到

n	\cdots	x_{-3}	x_{-2}	x_{-1}	x_0	x_1	x_2	x_3	\cdots
0					ε				
1				ε	$-\varepsilon$	ε			
2			ε	-2ε	3ε	-2ε	ε		
3		ε	-3ε	6ε	-7ε	6ε	-3ε	ε	
4	ε	-4ε	10ε	-16ε	19ε	-16ε	10ε	-4ε	ε

它会发散.

若要使计算结果具有可靠性, 各种扰动的影响必须得到控制, 即要有一定的**稳定性**. 下面研究线性差分格式的规范形式

$$u^{n+1} = \mathbb{B}u^n + \Delta t H^n, n = 0 : N-1, \quad (*)$$

其中 $N = \langle T/\Delta t \rangle$, $T > 0$ 是终止时刻.

稳定性概念同微分方程定解问题的真解有关, 是差分格式的固有性质, 刻画数值解关于定解数据的连续依赖性.

基于**线性叠加原理**, 稳定性概念常常分解为两个更简单的基本概念: (1)初值稳定性($f = 0$); (2)关于右端项的稳定性($u^0 = 0$).

定义 2.3.1 (初值稳定性) 考虑齐次线性差分格式

$$u^{n+1} = \mathbb{B}u^n, n = 0 : N-1, N\Delta t \leq T$$

(\mathbb{B} 可以和时间层数与网格函数有关; 若与网格函数有关, 则PDE是非线性的) 给定离散范数 $\|\cdot\| = \|\cdot\|_{\Delta x}$, 当 $\Delta x, \Delta t$ 趋于零时, 若数值解满足有界性

$$\|u^n\| \leq K\|u^0\|, \forall n = 0 : N,$$

其中界定常数 $K > 0$ 与 $\Delta x, \Delta t$ 和 u^0 均无关, 则称差分格式(*)按 $\|\cdot\|$ 具有初值稳定性.

注: 有界性的理解: 若 u, \tilde{u} 是关于方程(*)的两个解, 那么 $u - \tilde{u}$ 满足齐次线性差分格式, 于是上述有界性等价于这里的

$$\|u^n - \tilde{u}^n\| \leq K\|u^0 - \tilde{u}^0\|, \forall n = 0 : N,$$

注: 若 K 与 T 有关, 则称差分格式具有短时间的数值稳定性; 若界定常数与 T 无关, 则称差分格式有长时间的初值稳定性.

例 2.3.1 当且仅当 $\mu a \leq 1/2$ 时, 模型问题(HP)的全显格式具有最大模初值稳定性, 此时, 离散最大模原理成立.

证明: 全显格式是

$$u_j^{n+1} = \mu a(u_{j-1}^n + u_{j+1}^n) + (1 - 2\mu a)u_j^n.$$

系数和等于1, 且 $\mu a \leq 1/2$ 时系数非负. 那么

$$|u_j^{n+1}| \leq \max(|u_{j-1}^n|, |u_j^n|, |u_{j+1}^n|), \forall j.$$

于是 $\|u^{n+1}\|_{\infty} \leq \|u^n\|_{\infty}$.

另一方面, 当 $\mu a > 1/2$ 时, 右端出现负系数, 凸组合的系数结构不复存在. 反例: 设 $2J\Delta x = 1, u_j^0 = (-1)^j, j = 0 : 2J$ (偶数个特解) 那么

$$u_j^1 = \mu a[(-1)^{j-1} + (-1)^{j+1}] + (1 - 2\mu a)(-1)^j = (1 - 4\mu a)(-1)^j,$$

进一步可推出

$$u_j^n = (1 - 4\mu a)^n (-1)^j.$$

由于 $|1 - 4\mu a| > 1$, 则数值解趋于无穷, 全显格式不稳定.

例 2.3.2 模型问题(HP)的全隐格式无条件具有最大模的初值稳定性.

证明: 在所有网格点, 全隐格式的差分方程是

$$(1 + 2\mu a)u_j^{n+1} = u_j^n + \mu a(u_{j-1}^{n+1} + u_{j+1}^{n+1})$$

均具有隐式的凸组合系数结构, 即等号右端系数都是正的, 左端系数不低于右端系数之和. (右端矩阵是对角占优的, 且非对角元非负 $\Rightarrow \mathbb{B}_1$ 是M矩阵) 这样类型的数值格式满足离散最大模原理. 这是因为:

设 $|u_{j_0}^{n+1}| = \|u^{n+1}\|_{\infty}$ (因为(HP)问题只有有限个, 所以无穷范数sup就是max, 把取到max的地方记成 j_0), 由该点的差分方程可知

$$(1 + 2\mu a)|u_{j_0}^{n+1}| \leq \|u^n\|_{\infty} + 2\mu a\|u^{n+1}\|_{\infty},$$

从而 $\|u^{n+1}\|_{\infty} \leq \|u^n\|_{\infty}$. □

注: 对于(HI), (HD)问题, 这两个例子的结论也对. 有兴趣的可以看书.

定义 2.3.2 (右端项稳定性) 设差分格式(*)的初值是 $u^0 = 0$, 给定离散范数 $\|\cdot\| = \|\cdot\|_{\Delta x}$, 若当 Δt 和 Δx 趋于零时, 数值解满足

$$\|u^0\| \leq M \sum_{m=0}^{n-1} \|H^m\| \Delta t, \forall n = 1 : N,$$

其中界定常数 $M > 0$ 与 Δt 与 Δx 均无关, 则称格式具有**右端项稳定性**.

注: 本书重点关注初值稳定性, 不过多讨论右端项稳定性.

定理 2.3.1 初值稳定性蕴含右端项稳定性.

证明: 平行于微分方程的Duhamel原理, 差分格式(*)的数值解可以表示为

$$u^n = \sum_{m=0}^{n-1} v_{(m)}^n, n = 1, 2, \dots \quad (**)$$

其中网格函数 $v_{(m)} = \{v_{(m)}^l\}_{\forall l}$ 满足齐次差分格式 (**作业**, 直接验证)

$$\begin{aligned} v_{(m)}^{l+1} &= \mathbb{B}v_{(m)}^l, \quad l > m; \\ v_{(m)}^{l+1} &= \Delta t H^m, \quad l = m; \\ v_{(m)}^{l+1} &= 0, \quad l < m. \end{aligned}$$

(在 $0 : m - 1$ 休眠, 从 m 开始赋值, 后面就开始按照方程做时间推进)

注意到齐次差分格式 $u^{n+1} = \mathbb{B}u^n$ 具有初值稳定性, 由(**)可得

$$\|u^n\| \leq \sum_{m=0}^{n-1} \|v_{(m)}^n\| \leq K \sum_{m=0}^{n-1} \|v_{(m)}^{m+1}\| \leq K \sum_{m=0}^{n-1} \|H^m\| \Delta t.$$

分析稳定性的技术有很多.

上面例子中提到的方法是**离散最大模原理**: 如果任意网格点的差分方程都满足凸组合系数结构, 则差分格式满足离散最大模原理, 进而具有最大模稳定性. (这只是稳定的充分条件, 不一定是必要条件).

还有Fourier方法、能量方法、直接矩阵方法、分离变量法、修正方程方法等等.

例 2.3.3 考虑零边值的模型问题(HD), 其中 $f \equiv 0$. 利用直接矩阵方法, 讨论全显格式的初值稳定性.

证明: 利用全显格式的矩阵表示, 其数值解满足

$$u^{n+1} = \mathbb{B}u^n = \dots = \mathbb{B}^{n+1}u^0,$$

其中 $\mathbb{B} = \text{tridiag}(\mu a, 1 - 2\mu a, \mu a)$ 是 $J - 1$ 阶三对角矩阵. 若将网格函数视为 $J - 1$ 维的向量, 则有

$$\|u^n\|_{\infty} \leq \|B^n\|_{\infty} \|u^0\|_{\infty} \leq \|B\|_{\infty}^n \|u^0\|_{\infty}.$$

若 $\|B\|_{\infty} \leq 1$, 则 $\|u^{n+1}\|_{\infty} \leq \|u^0\|_{\infty}, \forall u$. 当 $2\mu a \leq 1$ 时, $\|B\|_{\infty} \leq 1$ 成立.

把 ∞ 换成2范数也成立!

$$\|u^{n+1}\|_{2,M} \leq \|B\|_{2,M} \|u^n\|_{2,M}$$

而不等号左边等价于网格函数的 L^2 范数 $\|u^{n+1}\|_{2,\Delta x}$: 只差 $\sqrt{\Delta x}$ 倍.

$$\|u^{n+1}\|_{2,\Delta x} = \sqrt{\sum_{j=1}^J |u_j^{n+1}|^2 \Delta x} = \sqrt{\Delta x} \|u^{n+1}\|_{2,M}.$$

而对 L^2 模,

$$\|B\|_{2,\Delta x} \equiv \|B\|_{2,M} \leq 1, \forall j,$$

这里 B 是对称三对角阵. 矩阵 B 的特征值可以精确表示为

$$\lambda_s = 1 - 4\mu a \sin^2 \frac{s\pi}{2J}, s = 1 : J-1,$$

当 $\mu a < 1/2$ 时, 谱范数满足

$$\|B\|_{2,M} = \max_{s=1:J-1} |\lambda_s| = \left| 1 - 4\mu a \sin^2 \frac{\pi \Delta x}{2} \right| \leq 1.$$

例 2.3.4 考虑零边值的模型问题(HD), 利用分离变量法, 证明全隐格式无条件具有 L^2 模的初值稳定性.

证明: 设 $f \equiv 0$, 即连续问题和差分格式都是齐次的, 在全隐格式中, \mathbb{B}_1 是三对角矩阵, \mathbb{B}_0 是单位矩阵, 矩阵 \mathbb{B}_1 具有特征值

$$\lambda_k = 1 + 4\mu a \sin^2 \frac{k\pi}{2J}, k = 1 : J-1,$$

相应一个的特征向量 $\{v_k\}_{k=1:J-1}$ 构成单位正交系. 由分离变量法, 全隐格式的数值解可以表示为

$$u^n = \sum_{k=1}^{J-1} \alpha_k \lambda_k^{-n} v_k,$$

其中 α_k 由初值确定, 注意到 $\lambda_k \geq 1$ 与 v_k 的正交性, 计算离散 L^2 模, 可得

$$\|u^n\|_2 = \left(\sum_{k=1}^{J-1} \alpha_k^2 \lambda_k^{-2n} \Delta x \right)^{1/2} \leq \left(\sum_{k=1}^{J-1} \alpha_k^2 \Delta x \right)^{1/2} = \|u^0\|_2.$$

即证. □

注: 作业: 用分离变量法把

$$u^n = \sum_{k=1}^{J-1} \alpha_k \lambda_k^{-n} v_k,$$

搞出来, 分析全显、全隐的 L^2 模的稳定性.

注: PDE的稳定性要求与 Δx 无关, ODE的稳定性不涉及 Δx .

如果把 $u^{n+1} = Bu^n + \Delta t H^n$ 拆成两个:

$$\begin{cases} \tilde{u}^{n+1} = B\tilde{u}^n + \Delta t \cdot 0 \\ \tilde{u}^0 = u^0 \end{cases} \quad \text{与} \quad \begin{cases} \tilde{\tilde{u}}^{n+1} = B\tilde{\tilde{u}}^n + \Delta t \cdot 0 \\ \tilde{\tilde{u}}^0 = 0 \end{cases}$$

那么 $u^n = \tilde{u}^n + \tilde{\tilde{u}}^n, \forall n$, 且

$$\|u^n\| \leq C \left[\|u^0\| + \sum_{m=0}^{n-1} \|H^m\| \Delta t \right].$$

例 2.3.5 分析差分格式

$$u_k^{n+1} = u_k^n - a \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_{k+1}^n - u_k^n), a < 0$$

的稳定性.

证明: 由相容性的讨论, 这个差分格式相容于下面PDE:

$$v_t + av_x = 0.$$

记 $R = a \frac{\Delta t}{\Delta x}$, 把格式改写为

$$u_k^{n+1} = (1 + R)u_k^n - Ru_{k+1}^n,$$

则

$$\begin{aligned} \sum_{k=-\infty}^{\infty} |u_k^{n+1}|^2 &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} |(1 + R)u_k^n - Ru_{k+1}^n|^2 \\ &\leq \sum_{k=-\infty}^{\infty} (|1 + R|^2 |u_k^n|^2 + 2|1 + R||R||u_k^n||u_{k+1}^n| + |R|^2 |u_{k+1}^n|^2) \\ &\leq \sum_{k=-\infty}^{\infty} (|1 + R|^2 |u_k^n|^2 + |1 + R||R|(|u_k^n|^2 + |u_{k+1}^n|^2) + |R|^2 |u_{k+1}^n|^2) \\ &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} (|1 + R|^2 + 2|1 + R||R| + |R|^2) |u_k^n|^2 \\ &= (|1 + R| + |R|)^2 \sum_{k=-\infty}^{\infty} |u_k^n|^2. \end{aligned}$$

或者改写为

$$\|u^{n+1}\|_2 \leq K_1 \|u^n\|_2, K_1 = |1 + R| + |R|.$$

令 $n = 1, 2, \dots$ 联立可得

$$K_1^{n+1} \leq K,$$

由稳定性的定义, 必定要有 $K_1 \leq 1$, (此时 $K = 1$), 解得 $-1 \leq R \leq 0$.

§ 2.4 Fourier方法

在前面分析了(HD)问题 L^2 模的稳定性和(HI),(HD),(HP)的无穷模稳定性. 其中(HD)问题 L^2 模的稳定性: 全显格式 $\mu a \leq 1/2$ 时稳定; 全隐格式无条件稳定. 对于(HI),(HP)问题的 L^2 模稳定性, 需要采用新的分析技术.

适用的研究对象: 设时空网格 $T_{\Delta x, \Delta t}$ 是等距的, 考虑线性常数系数双层格式

$$\sum_{s=-l_1}^{r_1} a_s u_{j+s}^{n+1} = \sum_{s=-l_0}^{s=r_0} b_s u_{j+s}^n. \quad (*)$$

其中 l_0, l_1, r_0, r_1 是非负整数, $\{a_s\}, \{b_s\}$ 是给定的差分系数, 与网格函数和网格点位置无关, 但可能与网格参数(如 Δt)有关. 换言之, 在任意网格点的差分方程都具有相同的形式.

对应空间网格的覆盖区域是否有界, 设(*)是纯初值问题或者周期边值问题(无边界问题).

Fourier方法是分离变量方法的场合性简化, 可以快速给出 L^2 模(初值)稳定性, 主要包括两个步骤:

- 增长因子的计算;
- von Neumann条件的验证.

其理论基础是网格函数与离散 L^2 范数的Fourier诠释过程, 其中

- Fourier积分理论用于低降函数.
- Fourier级数理论用于周期函数.

特别地, Parseval恒等式建立了时域函数与频域函数的 L^2 模联系.

以定义在整个数轴上的速降函数($xu(x) \rightarrow 0$, 当 $x \rightarrow \infty$)为例, 设 $T_{\Delta x} = \{x_m = m\Delta x\}_{m=-\infty}^{+\infty}$ 是定义在整个数轴上的等距空间网格, 相应的空间步长是 Δx . 假设网格函数 $u = \{u_m\}_{m=-\infty}^{+\infty}$ 的离散 L^2 模有限, 即

$$\|u\|_2 = \|u\|_{2, \Delta x} = \left(\sum_{m=-\infty}^{+\infty} |u_m|^2 \Delta x \right)^{1/2} < +\infty.$$

Fourier诠释过程

- 逐点常值延拓 u , 得到(连续型)阶梯函数 $\tilde{u}(x) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, 换言之, 定义

$$\tilde{u}(x) = u_m, x \in I(x_m), \forall m,$$

其中 $I(x_m) = ((m-1/2)\Delta x, (m+1/2)\Delta x)$ 是 x_m 点的控制区间. (可以画图理解) 那么 $\tilde{u} \in L^2(-\infty, +\infty)$, 且

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{u}(x)|^2 dx = \sum_{m=-\infty}^{\infty} |u_m|^2 \Delta x < \infty.$$

- 由Fourier理论, 存在一一对应的频域函数 $\hat{u}(k) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$, 使得

$$\begin{aligned}\hat{u}(k) &= \mathcal{F}\tilde{u}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \tilde{u}(x) dx, \\ \tilde{u}(x) &= \mathcal{F}^{-1}\hat{u}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \hat{u}(k) dk,\end{aligned}$$

这里 x 代表时空位置, k 是波数, $\tilde{u}(x)$ 是时域, $\hat{u}(k)$ 是频域.

- 由Parseval恒等式可知

$$\|u\|_{2,\Delta x}^2 = \|\tilde{u}\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 = \|\hat{u}\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} |\hat{u}(k)|^2 dk.$$

对于周期网格函数, 本质是一样的, 作周期延拓, 变成 $(-\infty, +\infty)$ 上的周期函数,

$$\tilde{u}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{ikx} \hat{u}_k, x \in [-\pi, \pi].$$

具体可以看书.

增长因子:

由(*)可知在整个数轴上几乎处处成立

$$\sum_{s=-l_1}^{r_1} a_s \tilde{u}^{n+1}(x + s\Delta x) = \sum_{s=-l_0}^{r_0} b_s \tilde{u}^n(x + s\Delta x), a.e.$$

作Fourier变换, 有

$$\sum_{s=-l_1}^{r_1} a_s \mathcal{F}(\tilde{u}^{n+1}(x + s\Delta x)) = \sum_{s=-l_0}^{r_0} b_s \mathcal{F}(\tilde{u}^n(x + s\Delta x)),$$

由Fourier变换的平移性质【作业: 验证Fourier变换的平移性质】

$$\mathcal{F}(\tilde{u}^n(x + s\Delta x)) = e^{isk\Delta x} \mathcal{F}(\tilde{u}^n(x)) = e^{isk\Delta x} \hat{u}^n(k).$$

可以得到差分格式的增长因子

$$\lambda(k) = \frac{\hat{u}^{n+1}(k)}{\hat{u}^n(k)} = \frac{\sum_{s=-l_0}^{r_0} b_s e^{isk\Delta x}}{\sum_{s=-l_1}^{r_1} a_s e^{isk\Delta x}}, \forall k \in \mathbb{R}.$$

注: $\hat{u}(k)$ 是 e^{ikx} 对应简谐波振幅. 波数为 k 的单位简谐波

$$\phi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$$

满足 $\|\phi_k(x)\|_{L^2(-\pi, \pi)} = 1$. $|\lambda(k)|$ 是 k 波数的简谐波 $\phi_k(x)$ 在单步时间推进之后的振幅变化率.

计算过程的简化:

研究对象: 设时空网格 $T_{\Delta x, \Delta t}$ 是等距的, 考虑线性常系数双层格式

$$\sum_{s=-l_1}^{r_1} a_s u_{j+s}^{n+1} = \sum_{s=-l_0}^{s=r_0} b_s u_{j+s}^n. \quad (*)$$

其中 l_0, l_1, r_0, r_1 是非负整数, $\{a_s\}, \{b_s\}$ 是给定的差分系数, 与网格函数和网格点位置无关, 但可能与网格参数(如 Δt)有关. 换言之, 在任意网格点的差分方程都具有相同的形式. (变系数不能用Fourier方法!)

回顾PDE理论, 通过对某些特解进行线性组合, 可以用Fourier级数来表示偏微分方程的真解. 任取波数 $k \in \mathbb{R}$, 如果把

$$u_j^n = \lambda^n e^{ikj\Delta x}, \forall j, \forall n$$

代入到差分方程(*), 可得

$$\sum_k a_s \lambda^{n+1}(k) e^{ik(j+s)\Delta x} = \sum_s b_s \lambda^n(k) e^{ik(j+s)\Delta x}.$$

简单的代数演算可以得到差分格式增长因子 $\lambda = \lambda(k)$, 其表达式就是前面的那一堆 $\lambda(k)$.

定理 2.4.1 双层格式(*)有 L^2 模稳定性即

$$\|u^n\|_{2, \Delta x} \leq K \|u^0\|_{2, \Delta x}, \forall n : n\Delta t \leq T$$

的充要条件是

$$|\lambda(k)|^n \leq K, \forall k \in \mathbb{R}, \forall n : n\Delta t \leq T. \quad (34)$$

其中 K 是一个(可能与 T 有关的)固定正常数.

注: 观察 $n \rightarrow n+1$ 的表现, $\lambda(k) = \frac{\hat{u}^{n+1}(k)}{\hat{u}^n(k)}$ 已知.

证明: 由Parseval恒等式与增长因子的定义, 可知

$$\begin{aligned} \|u^n\|_{2, \Delta x} &= \|\hat{u}^n(x)\|_{L^2(\mathbb{R})} = \int_{-\infty}^{+\infty} |\lambda(k) \hat{u}^{n-1}(k)|^2 dk \\ &\leq \sup_{k \in \mathbb{R}} |\lambda(k)| \|\hat{u}^{n-1}(k)\|_{L^2(\mathbb{R})} = \sup_{k \in \mathbb{R}} |\lambda(k)| \|\hat{u}^{n-1}(x)\|_{L^2(\mathbb{R})} = \sup_{k \in \mathbb{R}} |\lambda(k)| \|u^{n-1}\|_{L^2(\Delta x)} \\ &\leq \dots \leq [\sup_{k \in \mathbb{R}} |\lambda(k)|]^{n+1} \|u^0\|_{2, \Delta x} \end{aligned}$$

若稳定, 则

$$\|u^n\|_{2, \Delta x} \leq C \|u^0\|_{2, \Delta x}, \forall n.$$

等价于

$$\left[\sup_{k \in \mathbb{R}} |\lambda(k)| \right]^n \leq K, \forall n.$$

这就是题目给的条件.

定理 2.4.2 (标量)双层格式 L^2 模稳定的充要条件是von Neumann条件, 即当 Δx 适当小时, 有

$$|\lambda(k)| \leq 1 + C\Delta t, \forall k \in \mathbb{R}$$

其中 C 与 $k, \Delta t$ 均无关.

证明: : 必要性, 用不等式. 设 L 是给定正数, 则

$$L^x \leq 1 + Lx, x \in (0, 1). \quad (36)$$

记 $N = \langle T/\Delta t \rangle$, 当 Δt 适当小时, 有 $N\Delta t \geq T/2$, 由(34)与(36)可得

$$|\lambda(k)| \leq K^{1/N} \leq 1 + K/N \leq 1 + \frac{2K\Delta t}{T}, \forall k \in \mathbb{R}.$$

充分性: 由

$$\sup_{k \in \mathbb{R}} |\lambda(k)|^n \leq (1 + C\Delta t)^n \leq e^{c\Delta t n} = e^{CT}$$

从而得到稳定. □

例 2.4.1 (古典格式的 L^2 模稳定性) 考虑模型问题(HP)和(HI)的两个古典格式, 利用Fourier方法, 建立相应的 L^2 模初值稳定性结论.

证明: 将模态解 $u_j^n = \lambda^n e^{ikj\Delta x}$ 代入到全显格式, 简单计算可得

$$\lambda(k) = 1 + \mu a(e^{ik\Delta x} - 2 + e^{-ik\Delta x}) = 1 - 4\mu a \sin^2 \frac{k\Delta x}{2}.$$

增长因子没有显式出现 Δt (μ 包含 Δt), 相应 von Neumann 条件是

$$-1 \leq 1 - 4\mu a \sin^2 \frac{k\Delta x}{2} \leq 1, \forall k.$$

它等价于时空约束条件 $\mu a \leq 1/2$ (解方程). 增长因子是个数, 它也是全显格式具有 L^2 模稳定性的充要条件. □

注: 全隐格式无条件具有 L^2 模的初值稳定性. 【作业】

小结: (HP),(HD),(HI) 古典格式的 L^2, L^∞ 模稳定性: $\mu a \leq 1/2$ 时, 全显格式稳定. 对任意的 μ , 全隐格式无条件稳定.

习题: (Morton, 2.6题) (1) 证明: 方程 $z^2 + bz + c = 0$ 的两个根都按模不超过1的充要条件是: $|b| \leq 1 + c \leq 2$. (2) 证明格式

$$u_j^{n+1} - u_j^{n-1} = \frac{\mu}{3} [\delta_x^2 u_j^{n+1} + \delta_x^2 u_j^n + \delta_x^2 u_j^{n-1}]$$

是无条件 L^2 模稳定的. (3) 证明格式

$$u_j^{n+1} - u_j^{n-1} = \frac{\mu}{6} [\delta_x^2 u_j^{n+1} + 4\delta_x^2 u_j^n + \delta_x^2 u_j^{n-1}]$$

是无条件 L^2 模不稳定的.

习题: (Thomas, HW2.4.2题) 考虑初边值问题

$$\begin{cases} v_t + av_x = 0, & x \in (0, 1), t > 0, \\ v|_{t=0} = f(x), & x \in [0, 1], \\ v|_{x=1} = 0, & t \geq 0. \end{cases}$$

其中 $a < 0, \Delta x = 1/M$, 差分格式为

$$\begin{cases} u_k^{n+1} = (1 + R)u_k^n - Ru_{k+1}^n, k = 0, \dots, M-1, \\ u_M^{n+1} = 0, \\ u_k^0 = f(k\Delta x), k = 0, \dots, M. \end{cases}$$

其中 $R = a\Delta t/\Delta x$. 若 $|R| \leq 1$, 则这个差分格式是稳定的.

§ 2.5 收敛性

PDE真解与差分格式的数值解的关系是收敛性; 而差分格式的近似数值解与差分格式的真实数值解近似体现在舍入误差、稳定性.

定义 2.5.1 (局部描述) 设 u 是数值解, $[u]$ 是真解, 当网格参数 $\Delta x, \Delta t$ 趋于零时, 对于计算区域的任意位置 (x_*, t^n) , 均存在相应的网格点序列及其数值解序列, 使得

$$x_j(\Delta t) \rightarrow x_*, t^{n(\delta t)} \rightarrow t^*, u_{j(\Delta t)}^{n(\Delta t)} \rightarrow [u](x_*, t^*).$$

则称差分格式**(逐点)收敛**于定解问题.

注: Δt 理解为趋于0的任意序列, 且 $\Delta x, \Delta t$ 沿着某条路径趋于零.

若真解 $[u]$ 是连续的, 上述定义可以简化为: 当 $\Delta t, \Delta x$ 趋于零时, 有

$$e_j^n \equiv [u]_j^n - u_j^n \rightarrow 0, \forall j \forall n.$$

即数值误差在任意网格点上都趋于0. 这是因为 $[u]$ 的连续性可以得到 $[u]_j^n - [u]_*^* \rightarrow 0$, 再由

$$u_j^n - [u]_*^* = u_j^n - [u]_j^n + [u]_j^n - [u]_*^*$$

即可得到逐点收敛性.

定义 2.5.2 (整体描述) 给定离散范数 $\|\cdot\| = \|\cdot\|_{\Delta x}$, 当 Δx 和 Δt 趋于零时, 若数值误差(空间)网格函数 $e^n = \{e_j^n\}_{\forall j}$ 满足

$$\|e^n\| \rightarrow 0, \forall n, n\Delta t \leq T$$

则称差分格式按 $\|\cdot\|$ 模**收敛**于定解问题. 若存在不可改善的两个正数 m_1, m_2 , 使得

$$\|e^n\| = O((\Delta x)^{m_1} + (\Delta t)^{m_2}), \forall n,$$

则称差分格式按 $\|\cdot\|$ 模具有 (m_1, m_2) 阶**精度**(或者误差).

注: 收敛分析与误差估计(好的解)常常被混用, 主要区别在于真解光滑性假设不同. 通常收敛分析的要求偏低, 误差估计的要求偏高.

例 2.5.1 设模型问题(HP)的真解足够光滑, 建立全显格式的最大模误差估计.

注意到线性结构和逐点**相容性**概念, 有误差方程

$$e_j^{n+1} = \mu a(e_{j-1}^n + e_{j+1}^n) + (1 - 2\mu a)e_j^n + \Delta t \tau_j^n, \forall j, \forall n.$$

其中 τ_j^n 是局部截断误差, 假设真解 $[u_{xxxx}]$ 在 $[0, 1] \times [0, T]$ 上连续有界, 则

$$\max_{\forall j \forall n} |\tau_j^n| = O((\Delta x)^2 + \Delta t).$$

当 $\mu a \leq 1/2$ 时, 格式是稳定的, 于是有

$$\|e^{n+1}\|_{\infty} \leq \|e^n\|_{\infty} + \Delta t \|\tau^n\|_{\infty} \leq \dots \leq \|e^0\| + \sum_{m=0}^n \|\tau^m\|_{\infty} \Delta t \leq O((\Delta x)^2 + \Delta t).$$

也就是说最大模误差阶就是相容阶.

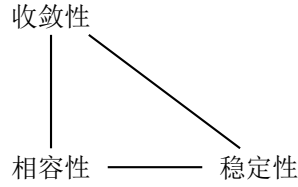
上述推导过程是显式推导(用相容性), 再看一种隐式推导(用稳定性), 由差分格式的稳定性可知

$$\begin{aligned}\|e^n\|_\infty &\leq C \left[\|e^0\|_\infty + \Delta t \sum_{0 \leq m \leq n-1} \|F^m\|_\infty \right] \\ &\leq C \left[0 + \sum_{0 \leq m \leq n-1} O(\Delta t + \Delta x^2) \Delta t \right] \\ &\leq CTO(\Delta t + \Delta x^2).\end{aligned}$$

显式推导和隐式推导本质上一致, 但推广不同.

注: 关于三个数值概念的说明:

- 数值概念依赖加密路径。若相容性同加密路径无关, 则称无条件相容; 否则, 称有条件相容。类似地, 还有无条件(或有条件)稳定, 无条件(或有条件)收敛等概念。
- 数值概念依赖度量范数。差分格式可以在某个范数下是相容/稳定/收敛的, 但在另一个范数下却是不相容/不稳定/不收敛的。
- 三个数值概念的理论分析难度是不同的, 其中相容性分析是最为简单的, 而稳定性分析和收敛性分析却是相对复杂的。对于线性差分格式来说, 稳定性分析要比收敛性分析容易一些。



定理 2.5.1 (Lax-Richtmyer等价定理) 假设线性微分方程定解问题是适定的, 若线性差分格式同它是相容的, 则稳定性和收敛性是等价的, 且误差阶不低于相容阶。

证明: “稳定性 \Rightarrow 收敛性” 考虑差分格式

$$\begin{aligned}B_1 u^{n+1} &= B_0 u^n + F^n, \quad (1) \\ u^0 &= [u]^0,\end{aligned}$$

其中当 Δx 适当小时, 整体相容性即左端系数矩阵的逆 B_1^{-1} 是一致有界的。

$$\|B_1^{-1}\| = \sup_{\|v\|=1} \|B_1^{-1}v\| \leq K_1 \Delta t. \quad (2)$$

局部截断误差为

$$T^n = B_1[u]^{n+1} - (B_0[u]^n + F^n), \quad (3)$$

对(1)(3)两式作差可得($u^n - [u]^n = e^n$)

$$\begin{aligned}B_1 e^{n+1} &= B_0 e^n - T^n \\ \Rightarrow e^{n+1} &= (B_1^{-1} B_0) e^n - B_1^{-1} T^n.\end{aligned}$$

对这个式子不断迭代, 可得

$$e^{n+1} = -B_1^{-1} T^{n-1} - (B_1^{-1} B_0) B_1^{-1} T^{n-2} - \cdots - (B_1^{-1} B_0)^{n-1} B_1^{-1} T^0. \quad (4)$$

根据稳定性,

$$\|(B_1^{-1} B_0)^n\| \leq K, \forall n = 0, 1, 2, \cdots \quad (5)$$

联立(2)(4)(5), 可得

$$\|e^n\| \leq K K_1 \Delta t \sum_{m=0}^{n-1} \|T^m\|. \quad (6)$$

由方程是适定的且差分格式有相容性, $T^m \rightarrow 0 (\Delta x, \Delta t \rightarrow 0)$, 所以对(6)式让 $\Delta t \rightarrow 0$ 即可得

$$u^n \rightarrow [u]^n,$$

收敛性证完. 同时收敛的误差阶不超过相容阶.

定义 2.5.3 若 \bar{A} 无内点, 则称 A 是**稀疏集**, 若集合为有限或可数个稀疏集的并, 则称之为**第一纲集**, 否则称为**第二纲集**.

定理 2.5.2 (Baire纲定理) 完备度量空间中的第一纲集无内点.

定理 2.5.3 (共鸣定理) 设 X, Y 是 Banach 空间, W 是所有从 X 到 Y 的有界线性算子构成的集类. 若 $\sup_{T \in W} \|Tx\| < \infty$, 则存在常数 M 使得 $\|T\| \leq M, \forall T \in W$. (即 W 中所有算子范数 $\|T\|$ 是一致有界的)

证明: 设 $X_n = \{x \in X \mid \|Tx\| \leq n\|x\|, \forall T \in L(X, Y)\}$. 由已知, 若 $\sup_{T \in W} \|Tx\| \leq M, x \in X$, 则 $x \in X_{\lfloor M \rfloor + 1}$, 从而 $\bigcup_{n=1}^{\infty} X_n = X$.
下设 $\{x_m\} \subset X_n$, 且 $x_m \rightarrow x^*$, 则 $\forall T \in W, \forall m$,

$$\|Tx^*\| \leq \|Tx_m\| + \|T(x_m - x^*)\| \leq n\|x_m\| + \|T\|\|x_m - x^*\| \rightarrow n\|x^*\| (m \rightarrow \infty).$$

故 $x^* \in X_n$, 即 X_n 闭.

由于 X 是 Banach 空间, 则有内点, 而它写成了 X_n 的可数并, 由 Baire 纲定理可知存在 $N > 0$ 使得 X_N 有内点. 故 $\exists x \in X_N, \delta > 0$, 使得 $B_\delta(x) \subset X_N$, 即 $\forall y \in B_\delta(x)$, 有 $\|Ty\| \leq N\|y\|, \forall T \in W$.

由

$$\|T(y - x)\| \leq \|Ty\| + \|Tx\| \leq N\|y\| + \|Tx\| \leq N\|y - x\| + 2N\|x\|,$$

对任意 $\|y - x\| = \frac{\delta}{2} > 0$, 有

$$\|T(y - x)\| \leq \|y - x\| \left(N + \frac{2N\|x\|}{\|y - x\|} \right) = \left(N + \frac{4N\|x\|}{\delta} \right) \cdot \|y - x\|, \forall T \in W.$$

根据 T 的线性, 可知

$$\|T\| \leq N \left(1 + \frac{4\|x\|}{\delta} \right), \forall T \in W.$$

从而 $\|T\|$ 是一致有界的. □

“收敛性 \Rightarrow 稳定性”: 需要用到共鸣定理(一致有界定理). 回顾: 稳定性是对于**齐次差分格式**而言的, 所以在(1)式令 $F^n \equiv 0$, 则

$$u^{n+1} = (B_1^{-1} B_0) u^n = \cdots = (B_1^{-1} B_0)^n u^0. \quad (7)$$

记 $B_1^{-1} B_0 = C(\Delta t)$, (注意 B_1, B_0 偶可以与 Δt 有关!) 我们证明初值 $u^0 \in \mathcal{B}$ (所有可取初值构成的空间), 其中 \mathcal{B} 是一个 Banach 空间.

当 Δt 充分小, 且 $n\Delta t \leq T$ 时, 设 $\|(C(\Delta t))^n u_0\|$ 关于 u_0 有界. 若不然, 可以选一系列不同的时间步长 $\Delta_1 t, \Delta_2 t, \cdots$, 使得 $\|(C(\Delta_1 t))^{n_1} u_0\|, \|(C(\Delta_2 t))^{n_2} u_0\|, \cdots$ 发散到无穷, 根据 $C(\Delta t)^n$ 关于 Δt 的连续依赖性, 且 $\Delta_j t$ 都充分小, 可知 $\Delta_j t \rightarrow 0$, 所以可以选择一个子列(不妨记这个子列就是原序列), 使得 $n_j \Delta_j t \rightarrow t$, 其中 $0 \leq t \leq T$. 根据(7), $\|u^{n_j}\| \rightarrow \infty$, 但是根据收敛性, $\|u^{n_j}\| < \infty$, 矛盾.

因此存在函数 $K_2(u)$, 使得

$$\|(C(\Delta t))^n u\| \leq K_2(u), \forall u \in \mathcal{B}.$$

根据共鸣定理, \mathcal{B} 中的元素是一致有界的, 即

$$\|(B_1^{-1}B_0)^n\| \leq M < \infty.$$

所以稳定性成立. □

因此, 把相容性和稳定性两个概念为重点讨论目标.

1. 给定等距分布的网格点 x_{j-1}, x_j, x_{j+1} 和 x_{j+2} , 设空间步长是 Δx , 利用待定系数法, 分别建立 $[u_{xxx}]$ 在 x_j 和 $x_j + \Delta x/2$ 处的差商离散.
2. 当 $f \equiv 0$ 时, Hermite 格式也叫 Douglas 格式. Hermite 格式为

$$\left(1 + \frac{1}{12}\delta_x^2\right)(u_j^{n+1} - u_j^n) = \frac{1}{2}\mu\delta_x^2(u_j^{n+1} + u_j^n) + \frac{1}{2}\Delta t \left[f_j^{n+1} + \left(1 + \frac{1}{6}\delta_x^2\right)f_j^n\right]$$

证明: 当网比 $\mu \in [1/6, 5/6]$ 时, Douglas 格式保持离散最大模原理.

3. 利用 Fourier 方法, 判断全隐格式 $u_j^{n+1} = u_j^n + \mu a \delta_x^2 u_j^{n+1}$ 的 L^2 模稳定性.
 4. 考虑一维反应扩散方程 $u_t = u_{xx} - \alpha u$ 的纯初值问题或周期边值问题, 其中 $\alpha = \pm 1$. 回答下列问题:
 - (1) 基于等距时空网格, 构造它的全显格式与全隐格式.
 - (2) 建立相应的 L^2 模稳定性.
 - (3) 检验数值格式的稳定性表现与偏微分方程的适定性表现是否一致? 若不一致, 能否给出简单的解决方案.
- (希望能理解 von Neumann 条件 $1 + C\Delta t$ 中 C 的作用.) 对于 (2) 问, 选 $[u]$ 为 u_j^n 还是 u_j^{n+1} ? (3) 问重点是 L^2 模是增加还是减少, 如果是真解 L^2 模增的, 数值解也会增; 如果真解 L^2 模是减的, 希望数值解也减. (源项的处理技术) 相容性不会有明显破坏, 但稳定性会有破坏. 这个问题是个综合性的题目, 花点时间.

第3章 热传导方程其他格式

考虑齐次PDE

$$u_t = au_{xx}, x \in [0, 1].$$

类型	格式名称	格式	相容阶	L^2 模稳定	最大模稳定
双层格式	全显格式	$u_j^{n+1} = u_j^n + \mu a \delta_x^2 u_j^n$	(2,1)	$\mu a \leq \frac{1}{2}$	$\mu a \leq \frac{1}{2}$
	全隐格式	$u_j^{n+1} = u_j^n + \mu a \delta_x^2 u_j^{n+1}$	(2,1)	无条件	无条件
	偏显格式 $\left(\theta < \frac{1}{2}\right)$	$u_j^{n+1} = u_j^n + \theta \mu a \delta_x^2 u_j^{n+1} + (1-\theta) \mu a \delta_x^2 u_j^n$	(2,1)	$\mu a(1-2\theta) \leq \frac{1}{2}$	$\mu a(1-\theta) < \frac{1}{2}$
	偏隐格式 $\left(\theta > \frac{1}{2}\right)$		(2,1)	无条件	$\mu a(1-\theta) < \frac{1}{2}$
	Douglas格式 $\mu a = \frac{1}{6(1-2\theta)}$		(4,2)	无条件	$\mu a \in \left[\frac{1}{6}, \frac{5}{6}\right]$
	Crank-Nicolson格式	$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{1}{2} \mu a (\delta_x^2 u_j^{n+1} + \delta_x^2 u_j^n)$	(2,2)	无条件	$\mu a < 1$
三层格式	Richardson格式	$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} + 2\mu a \delta_x^2 u_j^n$	(2,2)	不稳定	不稳定
	Du Fort-Frankel格式	$u_j^{n+1} - u_j^{n-1} = 2\mu a (u_{j-1}^{n-1} - u_j^{n+1} - u_j^{n-1} + u_{j+1}^n)$?	无条件	$\mu a \leq \frac{1}{2}$
	内插双层平均 $\left(\theta \in \left[\frac{1}{2}, 1\right]\right)$	$u_j^{n+1} - u_j^{n-1} = 2\mu a [(1-\theta) \delta_x^2 u_j^n + \theta \delta_x^2 u_j^{n-1}]$	(2,1)	$4\theta \mu a \leq 1$ 且与 $\theta \geq \frac{1}{2}$ 不同时取等	?
	外插双层平均 $\left(\theta \in \left[\frac{1}{2}, 1\right]\right)$	$u_j^{n+1} - u_j^{n-1} = \mu a [(1+\theta) \delta_x^2 u_j^n - \theta \delta_x^2 u_j^{n-1}]$	(2,1)	$2(1+2\theta) \mu a \leq 1$?
	外插CN格式	$u_j^{n+1} - u_j^{n-1} = \mu a \left[\frac{3}{2} \delta_x^2 u_j^n - \frac{1}{2} \delta_x^2 u_j^{n-1} \right]$	(2,2)	$4\mu a \leq 1$?
	三层平均 $\left(\theta \in \left[0, \frac{1}{2}\right]\right)$	$u_j^{n+1} - u_j^{n-1} = 2\mu a [\theta \delta_x^2 u_j^{n+1} + (1-2\theta) \delta_x^2 u_j^n + \theta \delta_x^2 u_j^{n-1}]$	(2,2)	当 $\theta \in [1/4, 1/2]$ 时无条件稳定, 否则不稳定	?

注: Du Fort-Frankel格式的相容阶取决于加密路径. 当 $\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$ 固定, 局部截断误差是 $O((\Delta x)^2)$; 当 $\frac{\Delta t}{\Delta x}$ 固定, 局部截断误差是 $O(1)$.

注: 最大模稳定性只给出一个充分条件.

§ 3.1 加权平均格式

热传导方程

$$u_t = au_{xx}, x \in [0, 1], t \in [0, T].$$

全显格式与全隐格式分别为

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} - u_j^n &= \mu a \delta_x^2 u_j^n, \\ u_j^{n+1} - u_j^n &= \mu a \delta_x^2 u_j^{n+1}, \end{aligned}$$

其中 $\mu = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$. 全显格式和全隐格式的相容阶都是(2,1), 如果需提高精度, 需要考虑其他格式.

把两个古典格式组合起来, 得到加权平均格式:

$$u_j^{n+1} - u_j^n = \theta \mu a \delta_x^2 u_j^{n+1} + (1-\theta) \mu a \delta_x^2 u_j^n,$$

两个格式的线性组合应当可以正负抵消部分低阶误差. 局部截断误差可以化作

$$\tau_j^n = -\Delta t \left(\theta - \frac{1}{2} \right) [u_{tt}]_j^{n+\frac{1}{2}} - \frac{a(\Delta x)^2}{12} [u_{xxx}]_j^{n+\frac{1}{2}} + O((\Delta x)^4 + (\Delta t)^2),$$

因此它至少有(2,1)阶局部截断误差.

当 $\theta = \frac{1}{2}$ 时, 加权平均格式变成

$$u_j^{n+1} - u_j^n = \frac{1}{2}\mu a (\delta_x^2 u_j^{n+1} + \delta_x^2 u_j^n),$$

这个格式叫Crank-Nicolson(CN)格式, 它无条件具有(2,2)阶局部截断误差.

代入 $[u_{tt}] = a^2[u_{xxxx}]$, 把加权平均格式的局部截断误差改写为

$$\tau_j^n = -\Delta t \left(\frac{1}{12\mu a} + \theta - \frac{1}{2} \right) [u_{tt}]_j^{n+\frac{1}{2}} + O((\Delta x)^4 + (\Delta t)^2),$$

令 $\frac{1}{12\mu a} + \theta - \frac{1}{2} = 0$ 即 $\mu a = \frac{1}{6(1-2\theta)}$, 此时得到Douglas格式, 它是有条件具有(4,2)阶局部截断误差(整体四阶相容).

用Fourier方法可以证明: 当 $\theta < \frac{1}{2}$ 时, 加权平均格式是有条件 L^2 模稳定的($\mu a(1-2\theta) \leq 1/2$), 当 $\theta \geq \frac{1}{2}$ 时, 加权平均格式是无条件 L^2 模稳定的.

用离散最大模原理可以证明: 当 $\theta < 1$ 时, 加权平均格式是有条件最大模稳定的($\mu a(1-\theta) \leq 1/2$), 当 $\theta = 1$ 时(全隐格式), 加权平均格式无条件最大模稳定.

注: 加权平均格式的稳定性结论与网格函数的度量方式有关.

§ 3.2 三层格式

Richardson格式: 如果用一阶中心差商来离散时间导数, 用二阶中心差商离散空间导数, 可以得到

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} + 2\mu a \delta_x^2 u_j^n.$$

它是显式格式, 且无条件具有(2,2)阶局部截断误差. 但是, 它无法用于大规模的数值运算, 作为一个著名的反面教材, 它让人们意识到数值稳定的重要性.

3.2.1 三层格式 L^2 模稳定性分析方法

在等距时空网格上, 把线性常系数标量型三层格式表示为

$$\sum_{s=-l_1}^{r_1} a_s^{(1)} u_{j+s}^{n+1} = \sum_{s=-l_0}^{r_0} a_s^{(0)} u_{j+s}^n + \sum_{s=-l_{-1}}^{r_{-1}} a_s^{(-1)} u_{j+s}^{n-1}.$$

其中 $\{l_k, r_k\}_{k=-1,0,1}$ 是非负整数, $\{a_s^{(k)}\}_{s=-l_k:r_k}^{k=-1,0,1}$ 是差分系数, 与网格函数与网格点的位置无关, 与网格参数可能有关. 用Fourier方法分析它的 L^2 模稳定性方法如下:

Step 1. 把双层格式转化为二维的向量型格式. 引进辅助网格函数 v^n , 定义向量型网格函数

$$\mathbf{w}^n = (u^n, v^n)^T,$$

则三层格式可以改写为等价的向量型双层格式:

$$\sum_{s=-l'_1}^{r'_1} \mathbb{A}_s^{(1)} \mathbf{w}_{j+s}^{n+1} = \sum_{s=-l'_0}^{r'_0} \mathbb{A}_s^{(0)} \mathbf{w}_{j+s}^n.$$

其中 $\mathbb{A}_s^{(k)}$ 是二阶矩阵, 与网格函数 \mathbf{w} 与网格点位置无关, 但可能与网格参数有关.

注: v^n 的定义不唯一, 最常用的是

$$v^n = u^{n-1}.$$

标量型三层格式的 L^2 模稳定性概念表述为: 存在 $K_1 > 0$, 使得

$$\|u^n\|_2 \leq K_1(\|u^0\|_2 + \|u^1\|_2), \forall n.$$

向量型双层格式的 L^2 模稳定性概念表述为: 存在 $K_2 > 0$, 使得

$$\|w^n\|_2 \leq K_2\|w^0\|_2, \forall n.$$

其中,

$$\|w^n\|_2 = (\|u^n\|_2^2 + \|v^n\|_2^2)^{1/2}.$$

不难证明, 标量型三层格式的 L^2 模稳定性与向量型双层格式的 L^2 模稳定性等价.

Step 2. 确定 L^2 模稳定的必要条件. 把向量型模态解

$$w_j^n = \hat{w}^n e^{ikj\Delta x}, k \in \mathbb{R}$$

代入向量型双层格式, 得到

$$w^{n+1} = Gw^n,$$

其中 G 是数值格式的增长矩阵(对应于标量双层格式的增长因子!)

设 $T > 0$ 是给定终止时刻, 则由Fourier方法基本理论, 向量型双层格式有 L^2 模稳定性的充要条件是: 存在 $K = K(T) > 0$, 使得当 Δt 充分小时,

$$\|G^n\|_{2,M} \leq K, \forall n : n\Delta t \leq T, \forall k.$$

其中 $\|\cdot\|_{2,M}$ 是矩阵2-范数($\|A\| = \sqrt{\rho(A^H A)}$).

von Neumann条件: 当 Δt 适当小时, 有 $\rho(G) \leq 1 + C\Delta t, \forall k$. 其中, $C > 0$ 与 $k, \Delta t$ 无关. 若 $C = 0$ 也满足此式, 此时 G 的所有特征值按模不超过1, 永远不会落在复平面的闭单位圆外面, 此时称为**严格的von Neumann条件**.

如果双层向量格式是 L^2 模稳定的, 则双层格式的增长矩阵满足von Neumann条件. (但是反之不一定成立! von Neumann条件只是稳定的一个必要条件! 有别于标量型双层格式!!!)

Step 3. 确定 L^2 模稳定的充分条件.

在适当条件下, von Neumann条件才能推出 L^2 模稳定. Kreiss(1962)和Buchanan(1963)建立了一系列的研究结果, 统称为Kreiss定理.

定理 3.2.1 当 Δt 充分小时, 如果二阶增长矩阵 $G(k, \Delta t)$ 是正规的, 即 $G^H G = G G^H$, 则von Neumann条件可以导出 L^2 模稳定性.

注: 这个结论对任意层的向量格式都对.

定理 3.2.2 当 Δt 充分小时, 如果二阶增长矩阵 $G(k, \Delta t)$ 的所有元素关于 k 一致有界, 且按模较小的特征值满足条件

$$|\lambda_2| \leq \delta < 1, \forall k \in \mathbb{R},$$

其中 δ 是给定的正数, 则von Neumann条件可以导出 L^2 模稳定性.

定理 3.2.3 当 Δt 充分小时, 如果二阶增长矩阵 $G(k, \Delta t)$ 具有完备的单位特征向量组, 按列组合形成矩阵 $Q(k, \Delta t)$, 若行列式满足

$$|\det Q(k, \Delta t)| \geq \delta > 0, \forall k \in \mathbb{R}$$

其中 δ 是给定的正数, 则von Neumann条件可以导出 L^2 模稳定性.

注: 此时 G 可以作相似变换变成对角阵, 即 $G = Q\Lambda Q^{-1}$, 其中 Q 是正交的, 从而 $Q^n = Q\Lambda^n Q^{-1}$, 这里加条件是让 Q^{-1} 较好.

例 3.2.1 Richardson格式无条件线性 L^2 模不稳定.

证明: 令 $v^n = u^{n-1}$, 定义 $\mathbf{w}^n = (u^n, v^n)^T$, 则根据

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= u_j^n + 2\mu a (u_{j-1}^n + u_{j+1}^n - 2u_j^n) \\ v_j^{n+1} &= u_j^n \end{aligned}$$

代入模态解 $\mathbf{w}_j^n = \hat{w}^n e^{ikj\Delta x}$, 可得增长矩阵为

$$\mathbb{G}(k, \Delta t) = \begin{pmatrix} -8\mu a \sin^2 \frac{k\Delta x}{2} & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

两个特征值为

$$\lambda_{1,2} = -4\mu a \sin^2 \frac{k\Delta x}{2} \pm \sqrt{1 + 16\mu^2 a^2 \sin^4 \frac{k\Delta x}{2}}.$$

显然存在某些 k 使得 $\sin^2 \frac{k\Delta x}{2} > \frac{1}{2}$, 因此

$$\max(|\lambda_1|, |\lambda_2|) > \mu a + \sqrt{1 + \mu^2 a^2} > 1 + \mu a.$$

因此von Neumann条件不成立, Richardson格式在 L^2 模度量下不稳定. \square

注: 如果直接把标量型的模态解 $u_j^n = \lambda^n e^{ikj\Delta x}$ 代入多层格式, 可以得到 $\{\lambda^n\}_{n \geq 0}$ 满足高阶差分方程, 例如Richardson格式为

$$\lambda^{n+1} + 8\mu a \sin^2 \frac{k\Delta x}{2} \lambda^n - \lambda^{n-1} = 0,$$

它可以导出增长矩阵的特征方程, 根就是增长矩阵的特征值

$$\lambda^2 + 8\mu a \sin^2 \frac{k\Delta x}{2} \lambda - 1 = 0,$$

注: Fourier方法适用于任意层数的格式.

3.2.2 其他格式

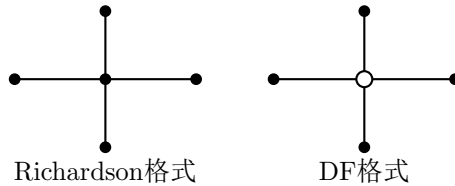
如果把Richardson格式的中心点 u_j^n 虚化, 用算术平均值 $\frac{u_j^{n+1} + u_j^{n-1}}{2}$ 代替, 可以得到Du Fort-Frankel(DF)格式:

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} + 2\mu a (u_{j-1}^n - u_j^{n+1} - u_j^{n-1} + u_{j+1}^n).$$

或者写成

$$\frac{1}{2} \frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{\Delta t} = a \frac{\delta_x^2 u_j^n}{(\Delta x)^2} - \frac{a(\Delta t)^2}{(\Delta x)^2} \frac{\delta_t^2 u_j^n}{(\Delta t)^2}.$$

注意离散模板的形状, 它又叫空心十字架格式.



DF格式的局部截断误差为

$$\tau_j^n = O\left((\Delta x)^2 + (\Delta t)^2 + \frac{(\Delta t)^2}{(\Delta x)^2}\right)$$

因此DF格式是有条件相容的. 如果 $\Delta t/\Delta x$ 固定, 则局部截断误差是 $O(1)$, 此时不相容.

注：根据DF格式，不难得知它也相容于如下的电报方程：

$$u_t = au_{xx} - \mu a \Delta t u_{tt},$$

有更加好的适定性。可以大胆猜测DF格式的稳定性也强于Richardson格式。事实上，DF格式是无条件 L^2 模稳定的，分析方法见前面一小节。（证稳定性的充分条件可以用第二个Kreiss定理）下面的定理也很常用：

定理 3.2.4 实系数二次方程 $x^2 + bx + c = 0$ 两个根按模不超过1的充要条件是 $|b| \leq 1 + c \leq 2$ 。

基于双层平均的三层格式。 下面设 $\theta \in [1/2, 1]$ 是给定的权重，基于不同线性插值方式，加权平均两个相邻时刻的空间导数离散，可得：

(1)基于内插方式有

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} + 2\mu a[(1-\theta)\delta_x^2 u_j^n + \theta\delta_x^2 u_j^{n-1}]$$

当且仅当 $4\theta\mu a \leq 1$ 且与 $\theta \geq \frac{1}{2}$ 不同时取等号时，具有 L^2 模稳定性。

(2)基于外插方式有

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} + 2\mu a[(1+\theta)\delta_x^2 u_j^n - \theta\delta_x^2 u_j^{n-1}]$$

当且仅当 $2(1+2\theta)\mu a \leq 1$ 时具有 L^2 模稳定性。

这两个格式无条件具有(2,1)阶局部截断误差，特别地， $\theta = 1/2$ 时外插方式得到的格式也叫外插Crank-Nicolson格式，无条件具有(2,2)阶局部截断误差。

基于三层平均的三层格式。 设 $\theta \in [0, 1/2]$ 是给定的权重，将三个相邻时刻的空间导数离散进行对称加权平均，得到

$$u_j^{n+1} - u_j^{n-1} = 2\mu a[\theta\delta_x^2 u_j^{n+1} + (1-2\theta)\delta_x^2 u_j^n + \theta\delta_x^2 u_j^{n-1}],$$

当 $\theta = 0$ 时它是Richardson格式，当 $\theta = 1/2$ 时它是对应时间步长为 $2\Delta t$ 的Crank-Nicolson格式。

这个格式无条件具有(2,2)阶局部截断误差，当 $\theta \in [1/4, 1/2]$ 时，它无条件具有 L^2 模稳定性。否则它是不稳定的。

3.2.3 三层格式的数值启动

定解问题有初值 $u(x, 0) = u_0(x)$ ，而三层格式需要两个初值。当然第0层可以设 $u_j^0 = u_0(x_j)$ 。第一层可以考虑用双层格式数值计算第一层的初值。若三层格式有时间方向的二阶局部截断误差，则启动格式在时间方向达到一阶相容即可，取CN格式、全显、全隐格式都可以计算第一层。

由于使用次数有限，启动格式无需满足时空约束条件，例如用全显格式启动时可以 $\mu a > 1/2$ 。

注：上述启动策略是普适的，可以用于任意层数的格式。

§ 3.3 计算效率的提升

3.3.1 时间步长的轮替策略

等距网格通常不是数值计算的最佳选择，如果能够依据真解的局部光滑程度，疏密相间设置时空网格点，则利用同一类型格式达到用户精度要求的整体计算量会显著减少，相应CPU时间会得到大幅度的降低。

下面设空间网格是等距的。

例 3.3.1 在保证全显格式 L^2 模稳定的前提下，若采用等距时间网格，则可用的最大时间步长是

$$\Delta t_{\max} = (\Delta x)^2 / (2a)$$

若循环交替使用两个时间步长 Δt_1 和 Δt_2 ，则可用的平均时间步长 $(\Delta t_1 + \Delta t_2)/2$ 可以达到 $2\Delta t_{\max}$ 。

证明: 用Fourier方法的基本原理, 经过 $\Delta t_1 + \Delta t_2$ 时间发展之后, k 波数的简谐波振幅变化率是

$$\lambda_1(k)\lambda_2(k) = (1 - 4\mu_1 ar)(1 - 4\mu_2 ar), \text{ 其中 } r = \sin^2(k\Delta x/2) \in [0, 1], \mu_i = \Delta t_i/(\Delta x)^2$$

格式是 L^2 模稳定的充要条件是von Neumann条件成立, 即

$$\max_{k \in \mathbb{R}} |\lambda_1(k)\lambda_2(k)| \leq 1.$$

取Chebyshev最佳逼近多项式, 即

$$(1 - 4\mu_1 ar)(1 - 4\mu_2 ar) = 8r^2 - 8r + 1$$

可以满足上式, 两个网比满足 $\mu_{1,2}a = 1 \pm \frac{\sqrt{2}}{2}$, 平均时间步长为 $(\Delta x)^2/a = 2\Delta t_{\max}$. □

3.3.2 显隐交替

进行数值计算时可以交替使用两种格式.

(1)按空间标号分组. 把空间指标是奇数(偶数)的点叫做奇数点(偶数点), 奇数点采用全显格式, 偶数点采用全隐格式, 则有

$$\begin{aligned} u_{2m+1}^{n+1} &= u_{2m+1}^n + \mu a \delta_x^2 u_{2m+1}^n, \\ u_{2m}^{n+1} &= u_{2m}^n + \mu a \delta_x^2 u_{2m}^{n+1}. \end{aligned}$$

计算的时候, 先显式计算所有奇数点值, 再求余下的偶数点值, 这样求解过程可以显式完成. 这个格式叫**半隐格式**. 这个格式的局部截断误差阶是(2,1).

分析 L^2 模稳定性时, 可以把这个格式视为向量型双层格式, 代入模态解

$$\begin{aligned} u_{2m+1}^j &= \hat{w}_1^n e^{ik(2m+1)\Delta x} \\ u_{2m}^j &= \hat{w}_2^n e^{ik(2m)\Delta x} \end{aligned}$$

让 $\mathbf{w}^n = (\hat{w}_1^n, \hat{w}_2^n)^T$, 得到递推关系与增长矩阵 G , 容易验证von Neumann条件为 $\mu a \leq 1$, 此时这个格式是无条件 L^2 模稳定的. 由Kreiss定理, von Neumann条件也是充分的.

与全显格式相比, 这个交替格式有宽松的 L^2 模稳定性条件, 计算效率可以达到全显格式的两倍.

(2)按时空指标之和分组. 若时空指标之和是奇数(偶数), 则把它叫做奇数点(偶数点), 让奇数点采用全显格式, 偶数点采用全隐格式, 可得到**跳点格式(hopscotch)**

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= u_j^n + \mu a \delta_x^2 u_j^n, \text{ 若 } n+j = \text{奇数} \\ u_j^{n+1} &= u_j^n + \mu a \delta_x^2 u_j^{n+1}, \text{ 若 } n+j = \text{偶数} \end{aligned}$$

它无条件具有 L^2 模稳定性.

当 $n+j$ 为偶数时, $n+j+1$ 为奇数, 从而

$$u_j^{n+2} = u_j^{n+1} + \mu a \delta_x^2 u_j^{n+1},$$

消去二阶中心差商项可得

$$u_j^{n+2} = 2u_j^{n+1} - u_j^n,$$

再消去奇数点值 u_j^{n+1} 可得

$$u_j^{n+2} = u_j^n + 2\mu a [u_{j-1}^{n+1} - u_j^n - u_j^{n+2} + u_{j+1}^{n+1}]$$

这就是DF格式. 即偶数点集构成了DF格式. 当网比固定时, 跳点格式有二阶相容性.

(3)按时间标号分组. 如果时间指标是奇数(偶数), 则称之为奇数点(偶数点), 在时间推进过程中交替使用全显和全隐格式, 即可得到**显隐交替格式**. 当然, 显隐交替格式比全隐格式的计算效率更高. 由于执行次序不同, 可以先显再隐:

$$\begin{aligned} u_j^{2m+1} &= u_j^{2m} + \mu a \delta_x^2 u_j^{2m}, \\ u_j^{2m+2} &= u_j^{2m+1} + \mu a \delta_x^2 u_j^{2m+2}. \end{aligned}$$

也可以先隐再显:

$$\begin{aligned} u_j^{2m+1} &= u_j^{2m} + \mu a \delta_x^2 u_j^{2m+1}, \\ u_j^{2m+2} &= u_j^{2m+1} + \mu a \delta_x^2 u_j^{2m+1}. \end{aligned}$$

容易验证这两个格式都是无条件 L^2 模稳定的.

先显再隐格式的偶数点对应Crank-Nicolson格式, 奇数点对应Richardson格式, 因此任意网格点都有(2,2)阶局部截断误差.

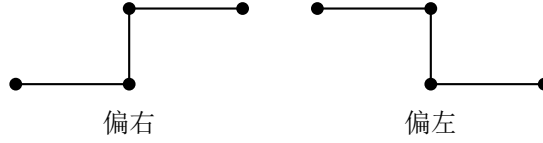
3.3.3 Saul'ev格式

Saul'ev格式是非对称格式, 采取左低右高或左高右低的方式, 不再左右对称. 偏右版本(左低右高):

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \mu a (u_{j+1}^{n+1} - u_j^{n+1} - u_j^n + u_{j-1}^n).$$

偏左版本(左高右低):

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \mu a (u_{j+1}^n - u_j^n - u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}).$$



偏右版本的离散过程如下: 设 $(x_j, t^{n+\frac{1}{2}})$ 为离散焦点, $t^{n+\frac{1}{2}} = (t^n + t^{n+1})/2$. 先用半步中心差商离散时间导数.

$$[u_t]_j^{n+\frac{1}{2}} = \frac{[u]_j^{n+1} - [u]_j^n}{\Delta t} + O(\Delta t)^2$$

再用一阶空间导数的半步中心差商, 并上下迁移时间的离散位置, 得到

$$\begin{aligned} [u_{xx}]_j^{n+\frac{1}{2}} &= \frac{[u_x]_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - [u_x]_{j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} + O(\Delta x)^2 \\ &= \frac{[u_x]_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - [u_x]_{j-\frac{1}{2}}^n + O(\Delta t)}{\Delta x} + O(\Delta x)^2 \end{aligned}$$

继续用中心差商离散一阶空间导数, 有

$$\begin{aligned} [u_x]_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} &= \frac{[u]_{j+1}^{n+1} - [u]_j^{n+1}}{\Delta x} - \frac{1}{24} [u_{xxx}]_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} (\Delta x)^2 + O(\Delta x)^4 \\ [u_x]_{j-\frac{1}{2}}^n &= \frac{[u]_j^n - [u]_{j-1}^n}{\Delta x} - \frac{1}{24} [u_{xxx}]_{j-\frac{1}{2}}^n (\Delta x)^2 + O(\Delta x)^4. \end{aligned}$$

这里的三阶导数可以迁移到离散焦点:

$$[u_{xxx}]_{j\pm\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}} = [u_{xxx}]_j^{n+\frac{1}{2}} + O(\Delta x + \Delta t).$$

略去无穷小量, 用数值解代替真解即可得到差分方程.

根据构造过程, Saul'ev格式的局部截断误差是

$$\tau_j^n = O\left((\Delta t)^2 + (\Delta x)^2 + \frac{\Delta t}{\Delta x}\right).$$

这是有条件相容的!

容易验证, Saul'ev格式无条件有 L^2 模稳定性.

一般不单独使用Saul'ev格式, 而是综合运用两个版本. 4种策略如下:

(1)循环扫描策略: 连续两次的时间推进过程中, 交替使用Saul'ev格式的两个版本.

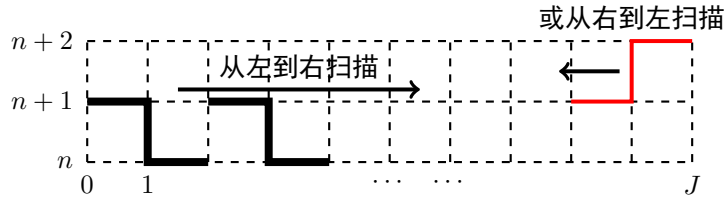
$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= u_j^n + \mu a(u_{j+1}^n - u_j^n - u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}) \\ u_j^{n+2} &= u_j^{n+1} + \mu a(u_{j+1}^{n+1} - u_j^{n+2} - u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}) \end{aligned}$$

消去中间时间层网格函数 $\{u_j^{n+1}\}$ 可得

$$u_j^{n+2} - u_j^n = \mu a \delta_x^2 (u_j^{n+2} + u_j^n) + (\mu a)^2 \delta_x^2 (u_j^{n+2} - u_j^n)$$

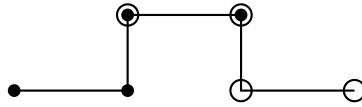
局部截断误差是

$$\tau_j^n = O\left((\Delta t)^2 + (\Delta x)^2 + \left(\frac{\Delta t}{\Delta x}\right)^2\right).$$



(2)显式分组格式. 如下图, 搭建Saul'ev格式的两个版本: (●和○对应两个不同版本)

$$\begin{aligned} (1 + \mu a)u_{2m+1}^{n+1} - \mu a u_{2m}^{n+1} &= (1 - \mu a)u_{2m+1}^n + \mu a u_{2m+2}^n, \\ -\mu a u_{2m+1}^{n+1} + (1 + \mu a)u_{2m}^{n+1} &= \mu a u_{2m-1}^n + (1 - \mu a)u_{2m}^n. \end{aligned}$$



把上面看作 $u_{2m}^{n+1}, u_{2m+1}^{n+1}$ 的线性方程组, 可以解得

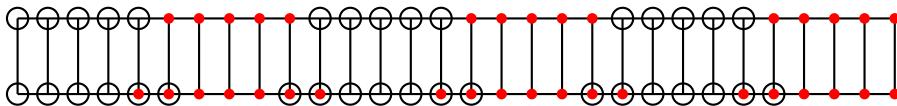
$$\begin{aligned} u_{2m}^{n+1} &= k_1 u_{2m-1}^n + k_2 u_{2m}^n + k_3 u_{2m+1}^n + k_4 u_{2m+2}^n \\ u_{2m+1}^{n+1} &= k_4 u_{2m-1}^n + k_3 u_{2m}^n + k_1 u_{2m+1}^n + k_1 u_{2m+2}^n \end{aligned}$$

其中 $k_1 = \frac{\mu a(1 + \mu a)}{1 + 2\mu a}, k_2 = \frac{1 - (\mu a)^2}{1 + 2\mu a}, k_3 = \frac{\mu a(1 - \mu a)}{1 + 2\mu a}, k_4 = \frac{(\mu a)^2}{1 + 2\mu a}.$

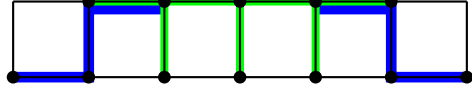
把空间网格点按奇数点与偶数点分成两组, 各组的推进可以并行计算, 分配给不同的CPU来执行, 计算效率提高.

显式分组格式与Saul'ev格式有相同的相容阶, 且显式分组格式 L^2 模稳定的充分必要条件是 $\mu a \leq 1$.

(3)隐式分组格式: 相当于把显式分组格式的思想作推广. 把空间网格点分割成若干个小规模的网格点组. (下图中, ●和○对应两个不同分组.)



在网格点组的内部用全隐格式, 而在网格点组的边界位置用Saul'ev格式(偏左或偏右). 这样, 全隐格式的耦合规模下降, 且各组变成线性方程组以后可以同步求解(并行计算), 每个网格点组只需要相邻点组提供两个公共数据即可, 并行效率很高. 此外, 隐式分组格式可以用更大的时间步长.



一个分组的计算方式(线性方程组构造过程)

(iv)平均策略. 用Saul'ev格式的两个版本给出后续时刻的两种网格函数 P_j^{n+1}, Q_j^{n+1} , 然后定义后续时刻的数值解为

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2}(P_j^{n+1} + Q_j^{n+1}),$$

消去辅助的 P_j^{n+1}, Q_j^{n+1} (作业), 可得

$$u_j^{n+1} - u_j^n = \mu a \delta_x^2 u_j^{n+1} + (\mu a)^2 \delta_x^2 (u_j^{n+1} - u_j^n) - \frac{1}{2}(\mu a)^2 \delta_x^4 u_j^n.$$

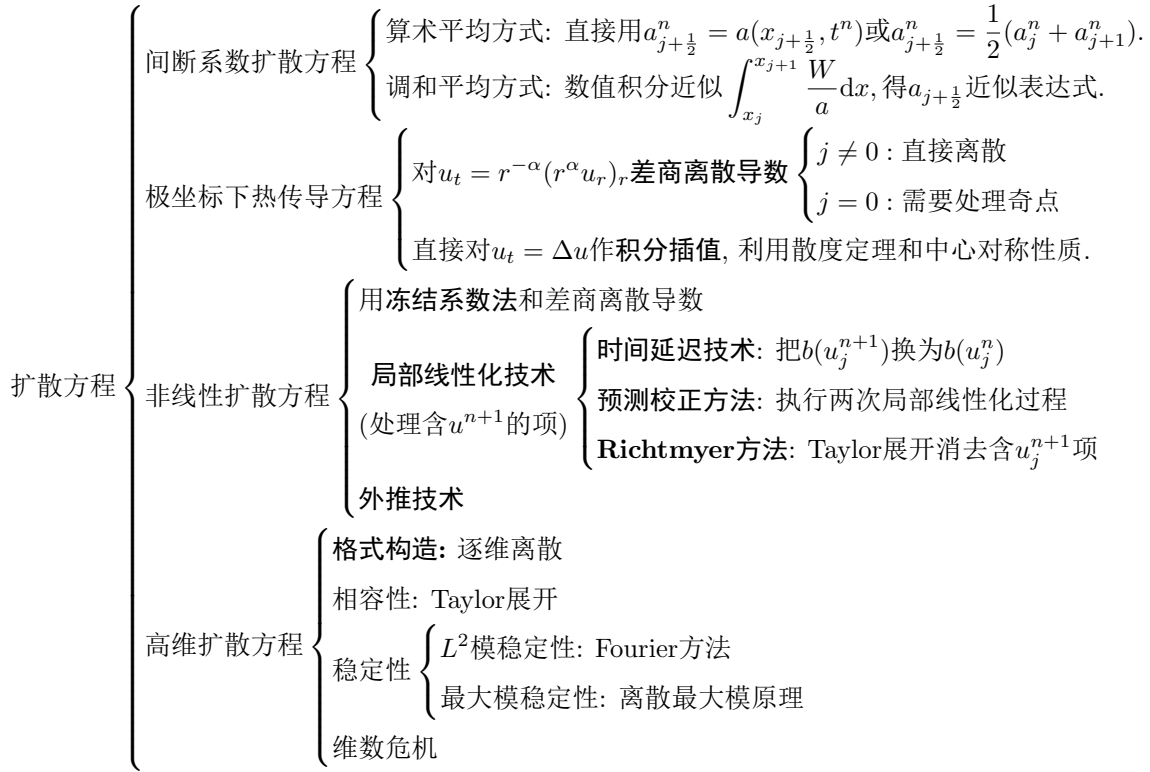
局部截断误差是

$$\tau_j^n = O\left(\Delta t + (\Delta x)^2 + \left(\frac{\Delta t}{\Delta x}\right)^2\right)$$

这两种策略都具有整体二阶的局部截断误差, 比单独用Saul'ev好.

注: 计算局部截断误差需要消去辅助的网格函数(回顾局部截断误差的定义). 但是分析稳定性不需要消去辅助网格函数.

第4章 一维扩散方程



这一章的重点是格式的构造方式, 关于相容性、稳定性的分析, 在前面应该很熟悉了, 读者可以自行验证.

§ 4.1 光滑系数的线性扩散方程

下面考虑非均匀介质的热传导方程, 有如下两种形式:

(i) 非守恒型扩散方程

$$u_t = a(x, t)u_{xx}$$

(ii) 守恒型扩散方程

$$u_t = (a(x, t)u_x)_x.$$

其中, $a(x, t)$ 是**扩散系数**. 为了保证方程是抛物型的, 这里设 $\inf_{x \in \Omega, t \in [0, T]} a(x, t) \geq \delta_0 > 0$, 即扩散系数在计算区域内有正的下确界. 如果给出一定的初始条件与边界条件, 可以证明真解存在唯一(回顾PDE).

下面都考虑纯初值问题或者周期边值问题, 并设 $a(x, t), u(x, t)$ 都足够光滑, 时空网格 $T_{\Delta x, \Delta t}$ 等距, 空间步长和时间步长分别为 $\Delta x, \Delta t$, 网比为 $\mu = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$.

4.1.1 非守恒型扩散方程

用**局部冻结技术**可以构造非守恒型扩散方程的差分方程.

在离散焦点冻结扩散系数, 可以得到非守恒型扩散方程的全显格式:

$$u_j^{n+1} - u_j^n = \mu a_j^n \delta_x^2 u_j^n,$$

同理有全隐格式

$$u_j^{n+1} - u_j^n = \mu a_j^n \delta_x^2 u_j^{n+1}.$$

这两个格式无条件具有(2,1)阶局部截断误差.

加权平均格式的扩散系数有两种冻结策略:

(i)多焦点策略:

$$u_j^{n+1} - u_j^n = \mu [\theta a_j^{n+1} \delta_x^2 u_j^{n+1} + (1 - \theta) a_j^n \delta_x^2 u_j^n]$$

其中 $\theta \in [0, 1]$, 且当 $\theta \neq \frac{1}{2}$ 时, 它无条件有(2,1)阶局部截断误差. 当 $\theta = \frac{1}{2}$ 时, 这是CN格式, 无条件具有(2,2)阶局部截断误差.

(ii)单焦点策略:

$$u_j^{n+1} - u_j^n = \mu a_j^* [\theta \delta_x^2 a_j^{n+1} + (1 - \theta) \delta_x^2 u_j^n]$$

这里 a_j^* 是扩散系数的局部冻结.

当 $\theta \neq \frac{1}{2}$ 时, 可以令 $a_j^* = a(x_j, t^*)$, 其中 $t^* \in [t^n, t^{n+1}]$, 此时差分方程无条件有(2,1)阶局部截断误差.

当 $\theta = \frac{1}{2}$ 时, 这是CN格式. 为了保持(2,2)阶局部截断误差, 需要精心设置 a_j^* , 设置方法有两种:

(a)仿照多焦点策略, 定义

$$a_j^* = \frac{1}{2}(a_j^n + a_j^{n+1});$$

(b)仿照线性常系数CN格式的构造过程, 直接把扩散系数冻结在最佳的离散焦点上:

$$a_j^* = a_j^{n+\frac{1}{2}} \equiv a\left(x_j, \frac{t^n + t^{n+1}}{2}\right).$$

可以发现, (a)是基于时间积分的梯形公式, (b)是基于时间积分的中点矩形公式. 容易证明这两种冻结方式都有(2,2)阶局部截断误差.

注: 上述所有格式都与常系数格式的相容阶保持一致.

下面给出相容阶更高的差分格式. 为了简单, 设扩散系数与时间无关, 即 $a(x, t) \equiv a(x)$, 基于加权平均格式, 构造非守恒型扩散方程的整体四阶格式(Douglas格式, 有条件相容).

回顾CN格式, 根据构造过程可知

$$\frac{[u]_j^{n+1} - [u]_j^n}{a_j \Delta t} - \frac{1}{2(\Delta x)^2} [\delta_x^2 [u]_j^n + \delta_x^2 [u]_j^{n+1}] = -\frac{(\Delta x)^2}{12} [u_{xxxx}]_j^{n+\frac{1}{2}} + O((\Delta x)^4 + (\Delta t)^2).$$

只需建立 $[u_{xxxx}]_j^{n+\frac{1}{2}}$ 的二阶相容的离散.

把空间导数变成时间导数, 并用相应的中心差商离散, 可得

$$\begin{aligned} [u_{xxxx}]_j^{n+\frac{1}{2}} &= [(a^{-1} u_t)_{xx}]_j^{n+\frac{1}{2}} = [(a^{-1} u)_{xxt}]_j^{n+\frac{1}{2}} \\ &= \frac{\delta_x^2 [a^{-1} u]_j^{n+1} - \delta_x^2 [a^{-1} u]_j^n}{(\Delta x)^2 \Delta t} + O((\Delta x)^2 + (\Delta t)^2). \end{aligned}$$

联立两式并用数值解代替真解, 可得整体四阶的差分方程:

$$\frac{\Delta_t u_{j+1}^n}{12a_{j+1}} + \frac{5\Delta_t u_j^n}{6a_j^n} + \frac{\Delta_t u_{j-1}^n}{12a_{j-1}} = \frac{1}{2}\mu(\delta_x^2 u_j^{n+1} + \delta_x^2 u_j^n).$$

若 $a(x) \equiv a$, 此时它就是常系数的Douglas格式.

注: 随着相容阶升高, 局部冻结会变得更加繁琐.

注: 以偏微分方程作为桥梁, 把时空方向导数进行相互转换, 克服了时空信息分布不均的困难, 使得离散模板的空间网格点分布更加紧凑, 从而可以把低阶格式转化为高阶格式.

4.1.2 守恒型扩散方程

最容易想到的差分格式设计思想是直接展开然后用差商离散导数.

$$u_t = a(x, t)u_{xx} + b(x, t)u_x, \text{ 其中 } b = a_x.$$

用中心差商离散空间导数, 向前差商离散时间导数, 并采用冻结系数方法, 可得全显格式

$$u_j^{n+1} - u_j^n = \mu a_j^n \delta_x^2 u_j^n + \frac{\Delta x}{2} \mu b_j^n (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n).$$

它无条件具有(2,1)阶局部阶段误差. 但是当 $a(x, t)$ 变化剧烈(或者是间断)的时候, 稳定性缺陷很严重. 这是因为, 守恒型扩散方程的热量守恒性质

$$\int_{z_1}^{z_2} u_t(x, t) dx = W(z_2, t) - W(z_1, t), \forall z_1, z_2, \forall t,$$

没有得到满意的数值保持, (即流入、流出不“相容”). 其中,

$$W = au_x$$

称为**热流量**. 本章范围内的 W 都采取这个定义保持不变.

我们需要数值实现热量的局部守恒性质. 常见方法如下:

(i)**积分插值方法**. 适合用于散度型导数的离散. 设计思想: 离散对象在某个局部区域的积分近似. 步骤如下:

- 选取适当的积分区域, 对PDE作积分.
- 用散度定理把高阶导数的高维积分变成低阶导数的低维积分.
- 用恰当的数值积分公式处理所得积分恒等式.
- 离散低阶导数.

下面用积分插值方法建立守恒型扩散方程的全显格式.

(a)首先选取区域 $(x_{j-\frac{1}{2}}, x_{j+\frac{1}{2}}) \times (t^n, t^{n+1})$, 对PDE作积分, 然后根据Newton-Leibniz公式可以得到如下恒等式:

$$\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} u(x, t^{n+1}) dx - \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} u(x, t^n) dx = \int_{t^n}^{t^{n+1}} W(x_{j+\frac{1}{2}}, t) dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} W(x_{j-\frac{1}{2}}, t) dt$$

(b)左侧采用**中点公式**近似, 右边采用**左矩形公式**近似, 可得

$$([u]_j^{n+1} - [u]_j^n) \Delta x \approx ([W]_{j+\frac{1}{2}}^n - [W]_{j-\frac{1}{2}}^n) \Delta t$$

(c)用一阶中心差商技术与冻结系数方法来离散热流量可得

$$[W]_{j+\frac{1}{2}}^n \approx a_{j+\frac{1}{2}}^n \frac{[u]_{j+1}^n - [u]_j^n}{\Delta x},$$

其中 $a_{j+\frac{1}{2}}^n$ 是扩散系数的局部冻结, 冻结方式可以是(都称作**算术平均冻结**, 后面还会有**调和平均冻结**)

$$a_{j+\frac{1}{2}}^n = a(x_{j+\frac{1}{2}}, t^n) \text{ 或 } a_{j+\frac{1}{2}}^n = \frac{1}{2}(a_j^n + a_{j+1}^n).$$

略去无穷小量, 用数值解代替真解, 可得守恒型扩散方程的全显格式:

$$u_j^{n+1} - u_j^n = \mu \left[a_{j+\frac{1}{2}}^n (u_{j+1}^n - u_j^n) - a_{j-\frac{1}{2}}^n (u_j^n - u_{j-1}^n) \right].$$

或者写

$$u_j^{n+1} - u_j^n = \mu \delta_x (a_j^n \delta_x u_j^n)$$

它无条件具有(2,1)阶局部截断误差.

注: (1)如果把步骤(b)的右边改为用**右矩形公式**近似, 可得全隐格式.

(2)右侧积分在区间 $[t^n, t^n + \theta(t^{n+1} - t^n)]$ 用左矩形公式, 在区间 $[t^n + \theta(t^{n+1} - t^n), t^{n+1}]$ 用右矩形公式, 可得加权平均格式

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \theta \mu \delta_x (a_j^n \delta_x u_j^n) + (1 - \theta) \mu \delta_x (a_j^{n+1} \delta_x u_j^{n+1}).$$

局部截断误差阶与常系数的情形保持一致.

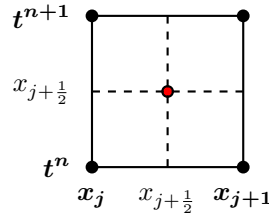
(ii)**盒子格式**. 基本思想是对微分方程进行**降阶处理**. 离散对象不是热传导方程, 而是与其等价的一阶微分方程组

$$u_t = v_x, \quad v = a(x, t) u_x.$$

这里 u 是原始变量, v 是辅助变量. 理论上辅助变量可以任意设置, 但它通常具有一定的计算目标或物理意义. 在这里, 辅助变量就是**热流量**, 即 $W = v = a u_x$.

具体步骤如下:

(a)在时空网格中取**四个紧凑排列的网格点**, 搭建出盒子形状的离散模板, 离散焦点为 $(x_{j+\frac{1}{2}}, t^{n+\frac{1}{2}})$ (**红点**).



(b)用中心差商技术离散第一个方程, 可得

$$\frac{[u]_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} - [u]_{j+\frac{1}{2}}^n}{\Delta t} \approx \frac{[v]_{j+1}^{n+\frac{1}{2}} - [v]_j^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x},$$

(c)在水平边的中点 $(x_{j+\frac{1}{2}}, t^n)$, 用中心差商与冻结系数方法, 离散第二个方程, 可得

$$[v]_{j+\frac{1}{2}}^n \approx a_{j+\frac{1}{2}}^n \frac{[u]_{j+1}^n - [u]_j^n}{\Delta x}.$$

这里 $a_{j+\frac{1}{2}}^n$ 的冻结方式如前.

(d)用整点的真解来逼近各边中点的真解, 即

$$\begin{aligned} [w]_{j+\frac{1}{2}}^n &\approx \frac{1}{2} ([w]_j^n + [w]_{j+1}^n) = \Pi_x [w]_{j+\frac{1}{2}}^n, \\ [w]_j^{n+\frac{1}{2}} &\approx \frac{1}{2} ([w]_j^n + [w]_j^{n+1}) = \Pi_t [w]_j^{n+\frac{1}{2}}, \end{aligned}$$

这里 $w = u$ 或 v , Π 是算术平均算子.

(e)略去无穷小量, 用数值解代替真解, 可得守恒型扩散方程的**盒子格式**

$$\begin{aligned} \frac{\Pi_x u_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} - \Pi_x u_{j+\frac{1}{2}}^n}{\Delta t} &= \frac{\Pi_t v_{j+1}^{n+\frac{1}{2}} - \Pi_t v_j^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x}, \\ \Pi_x v_{j+\frac{1}{2}}^n &= a_{j+\frac{1}{2}}^n \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{\Delta x}. \end{aligned}$$

这个格式无条件具有(2,2)阶局部截断误差(分析相容阶的时候需要消去辅助变量 v).

注: 如果扩散系数**恒定**, 即 $a(x, t) \equiv a > 0$, 则利用Fourier方法可以知道盒子格式无条件具有 L^2 模稳定性.

不是常系数的差分格式不能用Fourier方法! 这就是为什么我们前面一直都没有提到“稳定性”这个概念. 接下来我们来看一下上述变系数差分格式的稳定性分析方法.

§ 4.2 稳定性分析方法

Lax-Richtmyer等价定理在变系数情况下依旧成立, 即相容差分格式的稳定性与收敛性等价. 所以重点讨论对象依然是相容性与稳定性. 相容性分析方法依然是Taylor展开, 但稳定性的分析方法不能用Fourier方法, 要采取其他方式.

4.2.1 冻结系数方法

出发点: 当离散网格变密的时候, 扩散系数可以视为局部恒定, 甚至可以把线性变系数差分格式看作某个线性(或分片)常系数差分格式的微小扰动.

步骤:

- 把差分系数冻结为常数, 导出相应差分格式.
- 用其他准确的分析技术(Fourier方法、最大模原理等等)给出相应的稳定性结论.
- 考虑所有合理的系数冻结范围, 所有稳定性结论的交集就是冻结系数法给出的结果.

例 4.2.1 用冻结系数法给出非守恒型扩散方程的全显格式的最大模与 L^2 模稳定性条件:

$$u_j^{n+1} - u_j^n = \mu a_j^n \delta_x^2 u_j^n.$$

把 a_j^n 冻结为某个常数 a , 则全显格式可以变成线性常系数差分格式

$$u_j^{n+1} - u_j^n = \mu a \delta_x^2 u_j^n.$$

根据已知的稳定性结果可知, 最大模稳定性条件与 L^2 模稳定性条件都是 $\mu a \leq \frac{1}{2}$,

但这个结论只能反映网格点 (x_j, t^n) 附近的情形, 需要综合考虑所有的网格点. 让 a 遍历 a_j^n 的所有可能取值, 相应稳定性结论的交集是

$$\max_{\forall x \forall t} a(x, t) \mu \leq \frac{1}{2}.$$

这就是非守恒型扩散方程的全显格式的稳定条件. □

注: 根据离散最大模原理, 这个条件也可以保证全显格式的最大模稳定性. 但是在临界状态下, 全显格式的 L^2 模稳定性无法得到严格的理论验证

注: 冻结系数法完全忽略了系数变化带来的数值影响, 对于线性常系数问题稳定的某些格式, 有可能对于线性变系数问题出现“数值共振”现象(不满足最大模原理), 使得部分简谐波出现无法控制的增长, 造成线性不稳定现象.

注: 类似可以分析守恒型扩散方程的最大模稳定性条件是

$$\max_{\forall x \forall t} a(x, t) \mu \leq \frac{1}{2}, \text{ 且还要满足 } \Delta x \leq \inf_{\forall x \forall t} \frac{2|a(x, t)|}{|b(x, t)|}.$$

若扩散系数 $a(x, t)$ 沿着空间的变化非常剧烈($b(x, t)$ 很大), 如

$$a(x, t) = \sin^2 \frac{x}{\varepsilon} + 1, \varepsilon \ll 1,$$

则 Δx 要足够小, 空间网格要足够密集, 计算量很大, 效率很低. 一般来说, 若导数具有紧凑的散度型结构, 相应的数值格式更具有优势.

4.2.2 能量方法

能量方法可以用在线性变系数、非周期边值问题、非等距网格等情况。过程与PDE里面的能量方法类似。分析步骤:

- 选取适当的检验函数, 建立能量范数的递推关系式.
- 指出能量范数与离散 L^2 模的等价关系.
- 给出 L^2 模稳定性的充分条件.

例 4.2.2 考虑守恒型扩散方程 $u_t = (au_x)_x$ 的周期边值问题, 扩散系数 $a(x, t)$, $u(x, t)$ 均以1为周期. 用偏微分方程的能量方法可知

$$\int_0^1 u^2 dx \leq \int_0^1 u_0^2 dx, \text{ 其中 } u_0 \text{ 是初值函数}$$

基于等距时空网格构造周期边值问题的全显格式

$$u_j^{n+1} - u_j^n = \mu \left[a_{j+\frac{1}{2}}^n (u_{j+1}^n - u_j^n) - a_{j-\frac{1}{2}}^n (u_j^n - u_{j-1}^n) \right],$$

用能量方法给出 L^2 模稳定的充分条件.

为了简单, 我们设 $a(x, t) = a(x)$, 即扩散系数与时间无关(扩散系数与时间有关的时候分析过程是类似的).

在差分方程两端同乘检验函数 $u_j^{n+1} + u_j^n, j = 0 : J-1$, 把 J 个恒等式相加可得

$$\begin{aligned} LHS &\triangleq \sum_{j=0}^{J-1} (u_j^{n+1} - u_j^n)(u_j^{n+1} + u_j^n) \Delta x \\ &= \mu \sum_{j=0}^{J-1} \left[a_{j+\frac{1}{2}}^n (u_{j+1}^n - u_j^n) - a_{j-\frac{1}{2}}^n (u_j^n - u_{j-1}^n) \right] (u_j^{n+1} + u_j^n) \Delta x \triangleq RHS \end{aligned}$$

上式中

$$LHS = \sum_{j=0}^{J-1} (u_j^{n+1})^2 \Delta x - \sum_{j=0}^{J-1} (u_j^n)^2 \Delta x = \|u^{n+1}\|_{2, \Delta x}^2 - \|u^n\|_{2, \Delta x}^2.$$

为了简洁, 记 $\theta_{j+\frac{1}{2}}^n = a_{j+\frac{1}{2}}^n (u_{j+1}^n - u_j^n)$, $v_j^n = u_j^{n+1} + u_j^n$. 根据周期边界条件 $u_0^n = u_J^n$, $u_{J+1}^n = u_1^n$ 以及 $a(x)$ 周期性, 利用分部求和, 可知

$$\begin{aligned} RHS &= \sum_{j=0}^{J-1} (\theta_{j+\frac{1}{2}}^n - \theta_{j-\frac{1}{2}}^n)(u_j^{n+1} + u_j^n) \Delta x \\ &= -\mu \sum_{j=0}^{J-1} \theta_{j-\frac{1}{2}}^n (v_j^n - v_{j-1}^n) - \mu \theta_{J-\frac{1}{2}}^n v_J^n + \mu \theta_{-\frac{1}{2}}^n v_0^n \\ &= -\mu \sum_{j=0}^{J-1} \theta_{j-\frac{1}{2}}^n (v_j^n - v_{j-1}^n) \\ &= -\mu \sum_{j=0}^{J-1} a_{j-\frac{1}{2}}^n (u_j^n - u_{j-1}^n)(u_j^{n+1} - u_{j-1}^{n+1} + u_j^n - u_{j-1}^n). \end{aligned}$$

注意到恒等式

$$p(p+q) = \frac{1}{2}(p+q)^2 + \frac{1}{2}(p^2 - q^2),$$

这里 $p = u_j^n - u_{j-1}^n$, $q = u_{j-1}^{n+1} - u_j^{n+1}$, 则

$$RHS = -\mu \sum_{j=0}^{J-1} a_{j-\frac{1}{2}}^n \left(\frac{1}{2}(p+q)^2 + \frac{1}{2}(p^2 - q^2) \right).$$

定义系统的能量范数

$$\mathcal{E}(u^n) = \|u^n\|_{2,\Delta x}^2 - \frac{\mu}{2} \sum_{j=0}^{J-1} a_{j-\frac{1}{2}} (u_j^n - u_{j-1}^n)^2 \Delta x,$$

则

$$\mathcal{E}(u^{n+1}) - \mathcal{E}(u^n) = -\frac{1}{2}\mu \sum_{j=0}^{J-1} a_{j-\frac{1}{2}} (p+q)^2 \leq 0.$$

则 $\mathcal{E}(u^n)$ 是不增的. 由算术平均值不等式,

$$\|u^n\|_{2,\Delta x}^2 - \frac{1}{2}\mu A(2\|u^n\|_{2,\Delta x}^2 + 2\|u^n\|_{2,\Delta x}^2) \leq \mathcal{E}(u^n) \leq \mathcal{E}(u^0) \leq \|u^0\|_{2,\Delta x}^2.$$

其中 $A = \sup_{x \in (0,1)} a(x) > 0$. 若存在正常数 $\delta > 0$ 使得 $1 - 2\mu A \geq \delta$, 则 L^2 模稳定性成立, 即

$$\|u^n\|_{2,\Delta x}^2 \leq \frac{1}{\delta} \|u^0\|_{2,\Delta x}^2.$$

易知 $\delta < 1$, 则稳定性结论弱于偏微分方程定解问题的适定性结论. □

注: 在临界状态即 $2\mu A = 1$ 下, 变系数全显格式的 L^2 模稳定性结论不明确.

如果冻结系数与时间、空间都有关, 且 $|a_t| \leq C$, 此时的稳定性结论需要用到Gronwall不等式: 用归纳法可以证明.

定理 4.2.1 (Gronwall不等式) 设 $\{f_n\}_{n \geq 0}, \{g_n\}_{n \geq 0}$ 是非负序列, $\{g_n\}_{n \geq 0}$ 是递增序列, 如果存在 $C > 0$ 使得

$$f_{n+1} \leq C \sum_{m=0}^n f_m \Delta t + g_{n+1}, \forall n \geq 0,$$

则当 Δt 充分小时, $f_n \leq e^{Cn\Delta t} g_n$.

此时定义

$$\mathcal{E}(u^n) = \|u^n\|_{2,\Delta x}^2 - \frac{\mu}{2} \sum_{j=0}^{J-1} a_{j-\frac{1}{2}}^n (u_j^n - u_{j-1}^n)^2 \Delta x,$$

此时可以化出

$$\mathcal{E}(u^{n+1}) - \mathcal{E}(u^n) + \frac{\mu}{2} \sum_{j=0}^{J-1} (a_{j-\frac{1}{2}}^{n+1} - a_{j-\frac{1}{2}}^n) (u_j^{n+1} - u_{j-1}^{n+1})^2 \Delta x \leq 0.$$

由微分中值定理, $|a_{j-\frac{1}{2}}^{n+1} - a_{j-\frac{1}{2}}^n| \leq C\Delta t$, 则

$$\mathcal{E}(u^{n+1}) - \mathcal{E}(u^n) \leq \frac{\mu C \Delta t}{2} \sum_{j=0}^{J-1} (u_j^{n+1} - u_{j-1}^{n+1})^2 \Delta x \leq 2C\mu\Delta t \|u^{n+1}\|_{2,\Delta x}^2,$$

所以

$$\mathcal{E}(u^{n+1}) - \mathcal{E}(u^0) \leq 2C\mu\Delta t \sum_{k=1}^{n+1} \|u^k\|_{2,\Delta x}^2.$$

由于

$$(1 - 2\mu A) \|u^n\|_{2,\Delta x}^2 \leq \mathcal{E}(u^n) \leq \|u^n\|_{2,\Delta x}^2,$$

则

$$(1 - 2\mu A) \|u^{n+1}\|_{2,\Delta x}^2 \leq \|u^0\|_{2,\Delta x}^2 + 2C\mu\Delta t \sum_{k=1}^{n+1} \|u^k\|_{2,\Delta x}^2.$$

当 $1 - 2\mu A - 2C\mu\Delta t \geq \delta > 0$ 时, 由Gronwall不等式可知

$$\|u^n\|_{2,\Delta x}^2 \leq e^{\frac{2C\mu n\Delta t}{1-2\mu A-2C\mu\Delta t}} (1 - 2C\mu\Delta t) \|u^0\|_{2,\Delta x}^2 \leq e^{2CT\delta^{-1}} \|u^0\|_{2,\Delta x}^2,$$

显然, 稳定性结论更弱.

§ 4.3 间断系数的扩散方程

如果把两种不同材质焊接在一起, 整个系统的导热现象仍然可以用守恒型扩散方程 $u_t = (au_x)_x$ 来描述, 但是扩散系数在焊接点出现第一类间断. 为了简单起见, 下面设扩散系数是分片常函数, 即

$$a(x, t) = \begin{cases} a_L, & x < x_*, \\ a_R, & x > x_* \end{cases}$$

其中 $a_L \neq a_R$. 此时真解不再是古典解, 而是弱解, 且满足连接条件

$$u(x_*^+, t) = u(x_*^-, t), a_R u_x(x_*^+, t) = a_L u_x(x_*^-, t), \forall t > 0.$$

即温度 u 和热流量 W 处处连续. 因此守恒型扩散方程仍然满足局部守恒性质, 即对任意 $p < q$ 都有

$$\int_p^q [u(x, t^{n+1}) - u(x, t^n)] dx = \int_{t^n}^{t^{n+1}} [W(q, t) - W(p, t)] dt.$$

注: 对 $u_t = a_x u_x + a u_{xx}$ 直接作差分是行不通的, 因为 a_x 是Dirac函数. 如果避开间断点, 数值解不收敛于弱解. 但是我们可以考虑用积分插值方法, 它可以数值保持热量的局部守恒性质, 数值解一定收敛于真解.

下面的重点是扩散系数冻结方式对于误差表现的影响.

如果直接用前一节的算术平均方式来冻结, 数值实验表明误差表现不好, 为了寻找更好的局部冻结方式, 需要重新寻找方式离散热流量 $[W]_{j+\frac{1}{2}}^n$.

下面考虑对 $\frac{W(x, t^n)}{a(x, t^n)}$ 在区间 (x_j, x_{j+1}) 的积分近似, 下面暂时设 $a(x, t)$ 连续, 由积分中值定理可得

$$[u]_{j+1}^n - [u]_j^n = \int_{x_j}^{x_{j+1}} \frac{W(x, t^n)}{a(x, t^n)} dx \approx [W]_{j+\frac{1}{2}}^n \int_{x_j}^{x_{j+1}} \frac{dx}{a(x, t^n)},$$

代入 $W = au_x$, 以及 $[u]_j^n \approx \frac{[u]_{j+1}^n - [u]_j^n}{\Delta x}$, 从而扩散系数可以局部冻结为

$$a_{j+\frac{1}{2}} = \Delta x \left[\int_{x_j}^{x_{j+1}} \frac{dx}{a(x, t^n)} \right]^{-1}.$$

事实上如果 $a(x, t)$ 不连续, 这个冻结方式也适用.

下面用数值积分进行近似, 在间断点 $x_* \in [x_j, x_{j+1}]$ 两侧分别用左矩形公式和右矩形公式, 此时 $a_{j+\frac{1}{2}}$ 可以看作是两侧扩散系数的加权调和平均:

$$a_{j+\frac{1}{2}}^n = \left[\frac{\theta_{j+\frac{1}{2}}^n}{a_j^n} - \frac{1 - \theta_{j+\frac{1}{2}}^n}{a_{j+1}^n} \right]^{-1}, \quad (*)$$

其中

$$\theta_{j+\frac{1}{2}}^n = \begin{cases} (x_* - x_j)/\Delta x, & x_* \in [x_j, x_{j+1}], \\ 1/2, & \text{其他.} \end{cases}$$

当扩散系数的二阶导数连续有界时, 调和平均方式于算术平均方式非常接近, 比如

$$2 \left[\frac{1}{a_j^n} + \frac{1}{a_{j+1}^n} \right]^{-1} - \frac{1}{2} [a_j^n + a_{j+1}^n] = O((\Delta x)^2).$$

但是如果存在第一类间断点, 调和平均方式会有更大的优势.

定理 4.3.1 调和平均方式可以更加准确保持热流量在间断点两侧的连续性.

证明: 设 $x_* \in [x_j, x_{j+1}]$, 两侧扩散系数分别是 a_j^n, a_{j+1}^n . 则穿过间断点的热流量可以分别近似为

$$[W]_L^n \approx a_j^n \frac{[u]_*^n - [u]_j^n}{\theta_{j+1/2}^n \Delta x}, [W]_R^n \approx a_{j+1}^n \frac{[u]_{j+1}^n - [u]_*^n}{(1 - \theta_{j+1/2}^n) \Delta x},$$

其中 $[u]_*^n = u(x_*, t^n)$ 是位于间断点的未知温度. 如果间断点两侧的两种均匀材质也看作一种虚拟的均匀材质, 则相应扩散系数是待定常数 a_*^n , 穿过间断点 x_* 的热流量可以近似为

$$[W]_*^n \approx a_*^n \frac{[u]_{j+1}^n - [u]_j^n}{\Delta x}.$$

上面三种刻画方式应该尽可能相等 (才能保证热流量连续), 即

$$[W]_L^n \approx [W]_R^n \approx [W]_*^n,$$

消去 $[u]_*^n$, 解出来的 a_*^n 恰好就是调和平均扩散系数 (*).

□

数值实验表明, 调和平均方式冻结间断点比算术平均方式效果更佳.

§ 4.4 极坐标下的热传导方程

设 $\alpha = 1$ 或 $\alpha = 2$, 考虑 $\alpha + 1$ 维热传导方程

$$u_t = \Delta u, x \in \mathbb{R}^{n+1}, t > 0,$$

若真解有中心对称性, 即

$$u(x, t) = u(r, t), r \geq 0,$$

利用极坐标(球坐标)变换可以把热传导方程变成半无界区间上的变系数偏微分方程:

$$u_t = r^{-\alpha} (r^\alpha u_r)_r, r \geq 0, t > 0. \quad (4.1)$$

其中 $r = |x|$ 表示 x 到原点的距离.

4.4.1 差商离散导数

我们来构造(4.1)的全显格式. 考虑等距时间网格

$$T_{\Delta r, \Delta t} = \{r_j = j\Delta r\}_{j \geq 0} \otimes \{t^n = n\Delta t\}_{n \geq 0},$$

当 $j \geq 1$ 时, 数值离散方式很简单, 离散焦点记为 (r_j, t^n) , 用向前差商离散时间导数, 用插值积分离散散度型空间导数, 并采用冻结系数, 可得差分方程

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \frac{1}{r_j^\alpha (\Delta r)^2} \delta_r (r_j^\alpha \delta_r u_j^n).$$

当 $j = 0$ 时, 差分系数在网格点有奇性, 需要作特殊处理. 假设 $u(r, t)$ 充分光滑, 由中心对称性, $u_r(0, t) = 0$. 因此有Taylor展开公式:

$$u(r, t^n) = u(0, t^n) + \frac{1}{2}r^2 u_{rr}(0, t^n) + \frac{1}{6}r^3 u_{rrr}(0, t^n) + \cdots. \quad (4.2)$$

取 $r = \Delta r$ 可得

$$u_{rr}(0, t^n) \approx \frac{2}{(\Delta r)^2}([u]_1^n - [u]_0^n).$$

对(4.2)求导可得

$$u_r(r, t^n) = r u_{rr}(0, t^n) + \frac{1}{2}r^2 u_{rrr}(0, t^n) + \cdots.$$

代入(4.1)可得

$$\begin{aligned} u_t(r, t^n) &= r^{-\alpha} \left[r^{\alpha+1} u_{rr}(0, t^n) + \frac{1}{2} r^{\alpha+2} u_{rrr}(0, t^n) + \cdots \right]_r \\ &= (\alpha + 1) u_{rr}(0, t^n) + \frac{1}{2} (\alpha + 2) r u_{rrr}(0, t^n) + \cdots. \end{aligned}$$

令 $r \rightarrow 0$, 可得

$$u_t(0, t^n) = (\alpha + 1) u_{rr}(0, t^n) \approx \frac{2(\alpha + 1)}{(\Delta r)^2}([u]_1^n - [u]_0^n).$$

用向前差商离散时间导数并略去无穷小量, 得到

$$\frac{u_0^{n+1} - u_0^n}{\Delta t} = \frac{2(\alpha + 1)}{(\Delta r)^2} (u_1^n - u_0^n).$$

这样就定义了所有全显格式:

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{u_0^{n+1} - u_0^n}{\Delta t} &= \frac{2(\alpha + 1)}{(\Delta r)^2} (u_1^n - u_0^n), \\ \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} &= \frac{1}{r_j^\alpha (\Delta r)^2} \delta_r(r_j^\alpha \delta_r u_j^n). \end{aligned}} \quad (4.3)$$

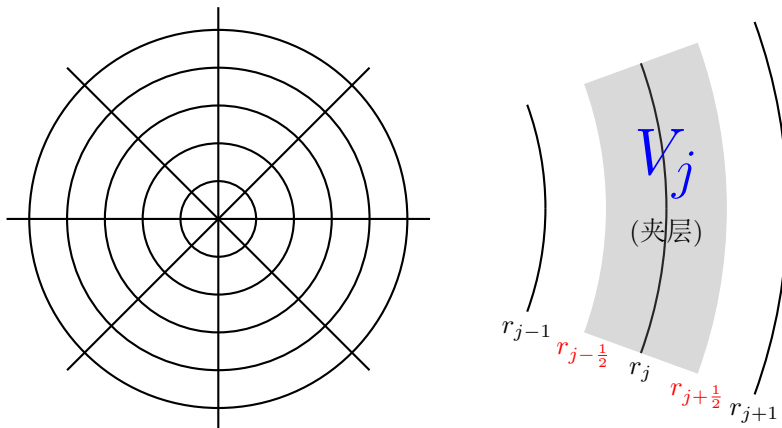
如果要想上面的格式有最大模稳定性, 只需让系数有凸组合结构. 令 $R = \frac{\Delta t}{(\Delta r)^2}$, 那么当

$$\begin{cases} 1 - 2R \geq 0, \\ 1 - 2(\alpha + 1)R \geq 0 \end{cases} \Rightarrow (\alpha + 1)R \leq \frac{1}{2}, \alpha = 1, 2.$$

时, 上述格式有最大模稳定性, 这个稳定性条件与空间维数有关!

4.4.2 积分插值法

直接用二维环形网格或三维球形网格也可以建立扩散方程(4.1)的数值格式. 真解的中心对称性质起着重要的地位.



把半径为 $r_{j+\frac{1}{2}} = \frac{r_j + r_{j+1}}{2}$ 的 α 维球面记作 $S_{j+\frac{1}{2}}$, 它的测度(即 α 维球面的表面积)为:

$$|S_{j+\frac{1}{2}}| = \pi(r_{j+\frac{1}{2}}) = r_{j+\frac{1}{2}}^\alpha \pi(1).$$

其中 $\pi(1)$ 是半径为1的 α 维球面表面积. 把球面 $S_{j-\frac{1}{2}}$ 和 $S_{j+\frac{1}{2}}$ 之间的夹层记作 V_j , 相应的测度(体积)是

$$|V_j| = \int_{r_{j-\frac{1}{2}}}^{r_{j+\frac{1}{2}}} dr = \int_{r_{j-\frac{1}{2}}}^{r_{j+\frac{1}{2}}} \pi(1)r^\alpha dr = \pi(1) \frac{r_{j+\frac{1}{2}}^{\alpha+1} - r_{j-\frac{1}{2}}^{\alpha+1}}{\alpha+1}.$$

在夹层 V_j 内积分高维热传导方程 $u_t = \Delta u$, 由散度定理和中心对称性质, 可得局部守恒定律:

$$\begin{aligned} \int_{V_j} u_t(x, t) dx &= \int_{V_j} \Delta u dx = \int_{\partial V_j} \frac{\partial u}{\partial n} dS \\ &= \int_{S_{j+\frac{1}{2}}} u_r dS - \int_{S_{j-\frac{1}{2}}} u_r dS \\ &= u_r(r_{j+\frac{1}{2}}, t) |S_{j+\frac{1}{2}}| - u_r(r_{j-\frac{1}{2}}, t) |S_{j-\frac{1}{2}}|. \end{aligned}$$

用中点公式对左边积分, 并离散时间导数于空间导数可得

$$\frac{[u]_j^{n+1} - [u]_j^n}{\Delta t} |V_j| \approx \frac{[u]_{j+1}^n - [u]_j^n}{\Delta r} |S_{j+\frac{1}{2}}| - \frac{[u]_j^n - [u]_{j-1}^n}{\Delta r} |S_{j-\frac{1}{2}}|.$$

代入 $|V_j|, |S_{j\pm\frac{1}{2}}|$ 表达式, 并略去高阶无穷小量, 得到

$$\boxed{\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \frac{\alpha+1}{\left[r_{j+\frac{1}{2}}^{\alpha+1} - r_{j-\frac{1}{2}}^{\alpha+1}\right] \Delta r} \delta_r(r_j^\alpha \delta_r u_j^\alpha)}. \quad (4.4)$$

可以发现, 当 $\alpha = 1$ 时, 它与前面得到的差分格式(4.3)一样, 但是当 $\alpha = 2$ 时, 它于前面得到的差分格式(4.3)不一样. 事实上, (4.4)数值上更好保持热量的局部守恒性质.

作业: 在半径为 $r_{1/2}$ 的圆或球内, 利用积分插值方法构造高维热传导方程

$$u_t = r^{-\alpha} (r^\alpha u_r)_r, r \geq 0, t \geq 0$$

的差分方程. 证明: 它就是

$$\frac{u_0^{n+1} - u_0^n}{\Delta t} = \frac{2(\alpha+1)}{(\Delta r)^2} (u_1^n - u_0^n).$$

证明: 对PDE两边同乘 r , 并在区域 $(0, r^{1/2}) \times [t^n, t^{n+1}]$ 内求积分可得

$$\int_0^{r^{1/2}} \int_{t^n}^{t^{n+1}} r u_t dt dr = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_0^{r^{1/2}} r^{-\alpha+1} (r^\alpha u_r)_r dr dt,$$

即

$$\int_0^{r^{1/2}} r u(r, t^{n+1}) dr - \int_0^{r^{1/2}} r u(r, t^n) dr = \int_{t^n}^{t^{n+1}} r^{1/2} u_r(r^{1/2}, t) + \alpha u(r^{1/2}, t) dt - \alpha \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(0, t) dt. \quad (*)$$

由于

$$\int_0^{r^{1/2}} r u(r, t^n) dr = \int_0^{r^{1/2}} (r - r^{1/2}) u(r, t^n) dr + \int_0^{r^{1/2}} r^{1/2} u(r, t^n) dr,$$

分别用右矩形公式与左矩形公式逼近可得

$$\int_0^{r^{1/2}} ru(r, t^n) dr \approx \frac{(\Delta r)^2}{4} [u]_0^n.$$

而对(*)等号右边都用左矩形公式可得

$$RHS \approx \frac{\Delta r \Delta t}{2} [u_r]_{1/2}^n + \alpha \Delta t [u]_{1/2}^n - \alpha \Delta t [u]_0^n.$$

根据

$$[u_r]_{1/2}^n \approx \frac{[u]_{1/2}^n - [u]_0^n}{\frac{1}{2}\Delta r}, [u]_{1/2}^n \approx \frac{[u]_0^n + [u]_1^n}{2}$$

可得

$$RHS \approx \Delta t \frac{[u]_1^n - [u]_0^n}{2} + \frac{\alpha \Delta t}{2} ([u]_1^n - [u]_0^n)$$

把如上得到的左边和右边整理即可得

$$\frac{u_0^{n+1} - u_0^n}{\Delta t} = \frac{2(\alpha + 1)}{(\Delta r)^2} (u_1^n - u_0^n).$$

□

§ 4.5 非线性扩散方程

非线性方程的计算效率和理论分析面临严峻挑战.

考虑下面较为简单的非线性热传导方程

$$u_t = b(u)u_{xx},$$

的初值问题或周期边值问题, 其中扩散系数 $b(\cdot) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^+$ 有正的下确界. 暂时跳过适定性和正则性的讨论, 直接设定解问题有足够光滑的唯一真解.

4.5.1 简单的差分格式

由冻结系数法和差商离散导数的过程, 可以得到全显、全隐、CN格式:

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= u_j^n + \mu b(u_j^n) \delta_x^2 u_j^n, \\ u_j^{n+1} &= u_j^n + \mu b(u_j^{n+1}) \delta_x^2 u_j^{n+1}, \\ u_j^{n+1} &= u_j^n + \frac{1}{2} \mu [b(u_j^n) \delta_x^2 u_j^n + b(u_j^{n+1}) \delta_x^2 u_j^{n+1}]. \end{aligned}$$

前两个格式有(2,1)阶局部截断误差, 最后一个格式有(2,2)阶局部截断误差.

L^2 模稳定性的分析方法也与前面提到的冻结系数法是类似的.

例 4.5.1 建立上述全显格式的 L^2 模稳定性结论.

解: 把 $b(u_j^n)$ 冻结为 b , 则非线性差分格式可以转化为局部的线性常系数差分格式:

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \mu b \delta_x^2 u_j^n.$$

它的 L^2 模稳定性的充要条件是 $\mu b \leq 1/2$. 因此非线性差分格式的 L^2 模稳定性的一个必要条件是

$$\mu \max_{j,n} b(u_j^n) \leq \frac{1}{2}.$$

注: 类似可以断定CN格式无条件有 L^2 模稳定性.

注: $b(u_j^n)$ 最大值是很难界定的, 数值格式的可靠性需要大量的数值实践和理论研究来支持.

4.5.2 局部线性化技术

非线性差分格式的计算效率堪忧, 全隐格式和CN格式一步推进需要解大规模非线性方程组, 计算效率很低, 此时得到的精确解也没有太大的用处. 事实上, 非线性方程组的精确求解是没必要的, 相对合理的迭代近似可以满足要求.

下面介绍三种常用的局部线性化技术. 即非线性差分格式可以被近似转换为某些线性差分格式.

1. 时间延迟技术.

以CN格式为例. 把 $b(u_j^{n+1})$ 换为 $b(u_j^n)$, 得到的差分方程为

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{1}{2}\mu b(u_j^n)\delta_x^2(u_j^n + u_j^{n+1}).$$

它有(2,1)阶局部截断误差.

2. 预测-校正方法.

同样以CN格式为例. 执行两次局部线性化过程, 可以得到差分方程:

$$\tilde{u}_j^{n+1} = u_j^n + \frac{1}{2}\mu [b(u_j^n)\delta_x^2 u_j^n + b(u_j^n)\delta_x^2 \tilde{u}_j^{n+1}] \quad (1)$$

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{1}{2}\mu [b(u_j^n)\delta_x^2 u_j^n + b(\tilde{u}_j^{n+1})\delta_x^2 u_j^{n+1}] \quad (2)$$

它有(2,2)阶局部截断误差.

3. Richtmyer方法(Taylor展开技术)

基本思想: 用时间方向Taylor展开公式, 通过偏微分方程和已知时间层信息, 高阶逼近差分方程的非线性部分.

例 4.5.2 考虑多孔介质方程 $u_t = (u^m)_{xx} (m > 1)$. 用Richtmyer方法给出CN格式

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{1}{2}\mu\delta_x^2(u_j^n)^m + \frac{1}{2}\mu\delta_x^2(u_j^{n+1})^m$$

的线性化格式.

解: CN格式有(2,2)阶相容, 则

$$[u]_j^{n+1} = [u]_j^n + \frac{1}{2}\mu\delta_x^2([u^m]_j^n) + \frac{1}{2}\mu\delta_x^2([u^m]_j^{n+1})$$

用 z^m 的Taylor公式:

$$\begin{aligned} z^m &= z_0^m + (z - z_0)mz_0^{m-1} + \cdots, \\ \Rightarrow [u^m]_j^{n+1} &= [u^m]_j^n + ([u]_j^{n+1} - [u]_j^n)m[u^{m-1}]_j^n + \cdots, \end{aligned}$$

略去无穷小量并用数值解代替真解, 联立两式可得

$$w_j^n = \mu\delta_x^2(u_j^n)^m + \frac{1}{2}m\mu\delta_x^2[(u_j^n)^{m-1}w_j].$$

其中, $w_j^n = u_j^{n+1} - u_j^n$ 是待解网格函数. 这样得到的格式可以保持时间方向的二阶相容!

作业: 用Richmyer局部线性化策略处理非线性热传导方程 $u_t = b(u)u_{xx}$ 的CN格式

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{1}{2}\mu [b(u_j^n)\delta_x^2 u_j^n + b(u_j^{n+1})\delta_x^2 u_j^{n+1}]$$

给出线性化格式.

答: 不线性的地方在 $b(u_j^{n+1})\delta_x^2 u_j^{n+1}$, 需要对它进行处理. 由Taylor展开,

$$b(u_j^{n+1})u_{j+k}^{n+1} \approx b(u_j^n)u_{j+k}^n + (b_t(u_j^n)u_{j+k}^n + b(u_j^n)(u_t)_{j+k}^n)(u_j^{n+1} - u_j^n), k = -1, 0, 1,$$

导数离散可以用向后差商:

$$(u_t)_{j+k}^n \approx \frac{u_{j+k}^n - u_{j+k}^{n-1}}{\Delta t}, k = -1, 0, 1,$$

所以用Richmyer法得到的线性化格式为

$$u_j^{n+1} - u_j^n = \frac{1}{2}\mu b(u_j^n)\delta_x^2 [u_j^n + u_j^{n+1}] + \left(b_t(u_j^n)\delta_x^2 u_j^n + b(u_j^n)\frac{\delta_x^2 u_j^n - \delta_x^2 u_j^{n-1}}{\Delta t} \right) (u_j^{n+1} - u_j^n).$$

4.5.3 外推技术

某些类型的多层格式对非线性扩散方程有明显的优势, 无须求解非线性方程组.

例如, 可以利用已知时间层信息进行**多项式外推**, 给出扩散系数的高阶近似. 进而构造出非线性热传导方程 $u(t) = b(u)u_{xx}$ 的外推CN格式

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{1}{2}\mu b(u_j^{n+\frac{1}{2}}) \left[\delta_x^2 u_j^{n+1} + \delta_x^2 u_j^n \right],$$

其中,

$$u_j^{n+\frac{1}{2}} = \frac{3}{2}u_j^n - \frac{1}{2}u_j^{n-1}.$$

这个格式关于 u^{n+1} 是线性的, 由Taylor展开技术可知, 它有(2,2)阶局部截断误差. 用冻结系数法可知, 它无条件 L^2 模稳定.

§ 4.6 高维扩散方程

前面的数值离散技术于理论分析方法都可以推广到高维扩散方程, 但是空间维数的提高会使得计算效率下降.

下面考虑二维线性常系数扩散方程

$$u_t = au_{xx} + bu_{yy}.$$

这里 a, b 都是正的常数. 若扩散系数 a, b 不是恒定的, 则用前面提到的冻结系数法等等也可以推广, 跟常数情形没有本质区别, 不再赘述.

考虑二维线性常系数扩散方程的**纯初值问题或周期边值问题**, 定义时空网格

$$T_{\Delta x, \Delta y, \Delta t} = \{(x_j, y_k, t^n)\}_{\forall j, \forall k}^n.$$

其中 $\Delta x, \Delta y$ 是两个不同方向的空间步长, Δt 是时间步长. 两个方向的网比分别记作

$$\mu_x = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}, \mu_y = \frac{\Delta t}{(\Delta y)^2}.$$

把真解用 $[\cdot]_{jk}^n$ 表示, 数值解用 \cdot_{jk}^n 表示.

例 4.6.1 构造二维扩散方程的加权平均格式和Du Fort-Frankel格式.

解: 逐维离散技术可以适用于高维扩散方程, 即沿着各自方向离散偏导数, 可得二维加权平均格式

$$u_{jk}^{n+1} = u_{jk}^n + \theta[\mu_x a \delta_x^2 u_{jk}^{n+1} + \mu_y b \delta_y^2 u_{jk}^{n+1}] + (1 - \theta)[\mu_x a \delta_x^2 u_{jk}^n + \mu_y b \delta_y^2 u_{jk}^n].$$

其中 $\theta \in [0, 1]$ 是给定权重.

类似地, 二维DF格式可以定义为

$$u_{jk}^{n+1} = u_{jk}^{n-1} + 2\mu_x a[u_{j-1,k}^n - u_{jk}^{n-1} - u_{jk}^{n+1} + u_{j+1,k}^n] + 2\mu_y b[u_{j,k-1}^n - u_{jk}^{n-1} - u_{jk}^{n+1} + u_{j,k+1}^n].$$

这就是二维Richardson格式的中心点值被上下两个时间层的算术平均值替代.

高维扩散方程的相容性、稳定性、收敛性的定义跟前面一样, 而且Lax-Richtmyer等级定理依然成立. 所以只需关注相容性和稳定性的概念.

空间维数仅仅影响离散范数的具体定义, 如基于前述时空网格, 二维空间网格函数

$$u^n = \{u_{jk}^n\}_{\forall j \forall k}$$

的最大模和 L^2 模分别定义为

$$\|u^n\|_\infty = \max_{\forall j \forall k} |u_{jk}^n|, \|u^n\|_2 = \left(\sum_{\forall j} \sum_{\forall k} (u_{jk}^n)^2 \Delta x \Delta y \right)^{1/2}.$$

当然, Fourier方法、最大值原理也可以用来分析这两个稳定性.

例 4.6.2 二维加权平均格式的局部截断误差为

$$\tau_{jk}^n = O((\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 + (2\theta - 1)\Delta t + (\Delta t)^2).$$

证明: 由PDE可知

$$[u_{tt}]_{jk}^n = a[u_{xxt}]_{jk}^n + b[u_{yyt}]_{jk}^n.$$

由Taylor展开,

$$\begin{aligned} [u]_{jk}^{n+1} - [u]_{jk}^n &= \Delta t [u_t]_{jk}^n + \frac{(\Delta t)^2}{2} [u_{tt}]_{jk}^n + O(\Delta t)^3, \\ \delta_x^2 [u]_{jk}^n &= (\Delta x)^2 [u_{xx}]_{jk}^n + O(\Delta x)^4 \\ \delta_y^2 [u]_{jk}^n &= (\Delta y)^2 [u_{yy}]_{jk}^n + O(\Delta y)^4, \\ [u_{xx}]_{jk}^{n+1} &= [u_{xx}]_{jk}^n + \Delta t [u_{xxt}]_{jk}^n + O(\Delta t)^2 \\ [u_{yy}]_{jk}^{n+1} &= [u_{yy}]_{jk}^n + \Delta t [u_{yyt}]_{jk}^n + O(\Delta t)^2 \end{aligned}$$

由局部截断误差的定义,

$$\begin{aligned}
 \tau_{jk}^n &= \frac{[u]_{jk}^{n+1} - [u]_{jk}^n}{\Delta t} - \theta \left[\frac{a}{(\Delta x)^2} \delta_x^2 [u]_{jk}^{n+1} + \frac{b}{(\Delta y)^2} \delta_y^2 [u]_{jk}^{n+1} \right] \\
 &\quad - (1-\theta) \left[\frac{a}{(\Delta x)^2} \delta_x^2 [u]_{jk}^n + \frac{b}{(\Delta y)^2} \delta_y^2 [u]_{jk}^n \right] \\
 &= [u_t]_{jk}^n + \frac{\Delta t}{2} [u_{tt}]_{jk}^n - \theta \left(a[u_{xx}]_{jk}^{n+1} + b[u_{yy}]_{jk}^{n+1} \right) \\
 &\quad - (1-\theta) \left(a[u_{xx}]_{jk}^n + b[u_{yy}]_{jk}^n \right) + O((\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 + (\Delta t)^2) \\
 &= [u_t]_{jk}^n - (a[u_{xx}]_{jk}^n + b[u_{yy}]_{jk}^n) \\
 &\quad + \frac{\Delta t}{2} [u_{tt}]_{jk}^n - \theta \Delta t \left(a[u_{xxt}]_{jk}^n + b[u_{xyt}]_{jk}^n \right) + O((\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 + (\Delta t)^2) \\
 &= \frac{(1-2\theta)\Delta t}{2} [u_{tt}]_{jk}^n + O((\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 + (\Delta t)^2) \\
 &= O((\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 + (2\theta-1)\Delta t + (\Delta t)^2)
 \end{aligned}$$

二维加权平均格式至少有(2,2,1)阶局部截断误差, 当 $\theta = 1/2$ 时对应CN格式有(2,2,2)阶局部截断误差. \square

例 4.6.3 二维加权平均格式的最大模稳定性.

解: 离散对象有最大模原理, 数值格式应当满足离散最大模原理. 仿照前面讨论, 把格式改写为

$$(1 + 2\theta(\mu_x a + \mu_y b))u_{jk}^{n+1} = \cdots + [1 - 2(1-\theta)(\mu_x a + \mu_y b)]u_{jk}^n.$$

省略部分的差分系数都是非负的. 若时间步长满足

$$\mu_x a + \mu_y b \leq \frac{1}{2(1-\theta)},$$

则等号右端的差分系数非负, 差分格式满足离散最大模原理, 相应格式有最大模稳定性. \square

注: 高维扩散方程的数值方法也有与一维不同的技术难点, 例如考虑

$$u_t = au_{xx} + bu_{yy} + 2cu_{xy}, c \neq 0,$$

当 $a > 0, b > 0, ab > c^2$ 时, 它是抛物方程, 满足最大模原理. 但是若混合偏导数用简单中心差商离散, 则全显格式

$$u_{jk}^{n+1} = u_{jk}^n + \mu_x a \delta_x^2 u_{jk}^n + \mu_y b \delta_y^2 u_{jk}^n + \frac{c\Delta t}{2\Delta x \Delta y} (u_{j+1,k+1}^n - u_{j+1,k-1}^n - u_{j-1,k+1}^n + u_{j-1,k-1}^n)$$

出现负系数, 离散最大模原理不再成立.

例 4.6.4 二维加权平均格式的 L^2 模稳定性.

注: 标量双层格式 L^2 模稳定的充要条件依然是von Neumann条件

$$|\lambda(l_1, l_2)| \leq 1 + C\Delta t, \forall l_1, l_2.$$

其中 $C \geq 0$ 与 $\Delta x, \Delta y, \Delta t, l_1, l_2, n$ 都无关. 若增长因子表达式没有显式含有时间步长 Δt , 只需考虑严格von Neumann条件

$$|\lambda(l_1, l_2)| \leq 1, \forall l_1, l_2.$$

解: 设 l_1, l_2 是任意实数, 把二维模态解

$$u_{jk}^n = \lambda^n e^{i(jl_1 \Delta x + kl_2 \Delta y)}$$

代入二维加权平均格式, 可得

$$\lambda = \lambda(l_1, l_2) = \frac{1 - 4(1 - \theta)s}{1 + 4\theta s}.$$

其中,

$$s = \mu_x a \sin^2 \frac{l_1 \Delta x}{2} + \mu_y b \sin^2 \frac{l_2 \Delta y}{2}.$$

二维加权平均格式 L^2 模稳定的充要条件是严格的von Neumann条件:

$$(1 - 2\theta)(\mu_x a + \mu_y b) \leq \frac{1}{2}.$$

当 $\theta \geq \frac{1}{2}$ 时, 偏隐格式无条件 L^2 模稳定; 当 $\theta < \frac{1}{2}$ 时, 偏显格式有条件 L^2 模稳定. \square

注: 偏显格式时间推进受到空间维数的负面影响, 容易推出: 求解 d 维扩散方程时, 空间步长折半会导致数据量增加 $d \cdot 2^{d+2}$ 倍, 出现“维数危机”. 对高维问题的初边值问题, 空间网格通常有糟糕的结构, 维数危机更加严重.

$$\left. \begin{array}{l} \text{边界条件} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} \text{一维情形} \left\{ \begin{array}{l} \text{单侧离散: } O(1) \\ \text{双侧离散} \left\{ \begin{array}{l} \text{虚拟网格法: } O(\Delta x + \Delta t) \\ \text{半网格方法: } O(\Delta x + \Delta t) \end{array} \right. \\ \text{矩形区域: 对每个边界采用一维情形的离散方法} \end{array} \right. \\ \text{二维情形} \left\{ \begin{array}{l} \text{任意区域 (非规则内点)} \left\{ \begin{array}{l} \text{本质边界条件} \left\{ \begin{array}{l} \text{简单迁移} \left\{ \begin{array}{l} \text{常值延拓} \\ \text{线性插值} \end{array} \right. \\ \text{非等臂长} \end{array} \right. \\ \text{自然边界条件} \left\{ \begin{array}{l} \text{简单迁移} \\ \text{积分插值} \end{array} \right. \end{array} \right. \end{array} \right. \end{array} \right.$$

§ 4.7 一维导数边界条件

我们在前面都在研究纯初值问题或周期边值问题, 那对初边值问题, 对于某些边界条件, 需要作额外的考虑. Dirichlet条件又称本质边界条件, Neumann与Robin边界条件又称自然边界条件. 为了叙述简洁, 下面直接考虑混合边界条件.

考虑带有混合边界条件的热传导方程初边值问题(其中 $a > 0$)

$$(HX) \quad \begin{cases} u_t = au_{xx}, x \in [0, 1], t \in [0, T], \\ u(x, 0) = u_0(x), x \in [0, 1], \\ -au_x(0, t) + \sigma u(0, t) = \phi_0(t), t \in [0, T], \\ u(1, t) = \phi_1(t), t \in [0, T], \end{cases}$$

其中 u_0, ϕ_0, ϕ_1 都是已知函数, $\sigma \geq 0$ 是给定常数, $T > 0$ 是终止时刻. 由PDE理论可知混合边值问题(HX)是适定的.

本质边界条件的离散是简单的, 难度的关键是自然边界条件的离散. 需要建立自然边界条件的差商离散方式, 并研究相容性、稳定性、收敛性是否会受到影响.

4.7.1 单侧离散方式

设等距空间网格为

$$T_{\Delta x}^{(1)} = \{x_j = j\Delta x\}_{j=0}^J,$$

其中 $\Delta x = \frac{1}{J}$ 是空间步长.

本质边界条件的差分方程是

$$u_J^n = \phi_1(t^n).$$

而自然边界条件的离散方式为单侧差商离散:

$$-a \frac{u_1^n - u_0^n}{\Delta x} + \sigma u_0^n = \phi_0(t^n).$$

内部网格点的差分方程(以全显格式为例)是

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \mu a \delta_x^2 u_j^n, j = 1 : J - 1.$$

把三条式子联立就得到封闭的离散系统.

如果定义内部空间网格函数为

$$u^n = (u_1^n, u_2^n, \dots, u_{J-1}^n)^T, \forall n,$$

并定义

$$\Phi^n = \left(\frac{a}{\Delta x(a + \sigma \Delta x)} \phi_0(t^n), 0, \dots, 0, \frac{a}{(\Delta x)^2} \phi_1(t^n) \right)^T, \forall n.$$

那么全显格式可以写成

$$u^{n+1} = \mathbb{A} u^n + \Delta t \Phi^n,$$

其中

$$\mathbb{A} = \left(\begin{array}{c|ccc} 1 - \left(2 - \frac{a}{a + \sigma \Delta x} \right) \mu a & \mu a & 0 & \dots \\ \hline \mu a & & & \\ 0 & & & \\ \vdots & & & \end{array} \middle| \begin{array}{l} \text{tridiag}(\mu a, 1 - 2\mu a, \mu a) \end{array} \right)$$

类似也可以写出全隐格式的网格函数表示.

下面分析相容性. 当 $j \geq 2$ 时, 差分方程远离自然边界条件, 离散对象就是偏微分方程. 但是当 $j = 1$ 时, 差分方程与自然边界条件与微分方程离散方式都有关, 所以没有明确的离散对象!

为了简单起见, 仍然讨论逐点相容性来代替整体相容性的概念. 当网格点远离边界时, 讨论方法与前面一样. 只需关心自然边界条件附近的有限个差分方程的表现.

定理 4.7.1 用单侧离散方式处理自然边界条件, 全显格式在 x_1 的局部截断误差是 $O(1)$ 的.

证明: 差分方程在 x_1 处的局部描述是

$$\frac{u_1^{n+1} - u_1^n}{\Delta t} = a \frac{u_2^n - 2u_1^n}{(\Delta x)^2} + \frac{a}{\Delta x(a + \sigma \Delta x)} \left[\frac{au_1^n}{\Delta x} + \phi_0(t^n) \right].$$

局部截断误差是

$$\tau_1^n \equiv \frac{[u]_1^{n+1} - [u]_1^n}{\Delta t} - a \frac{[u]_2^n - 2[u]_1^n}{(\Delta x)^2} + \frac{a}{\Delta x(a + \sigma \Delta x)} \left[\frac{a[u]_1^n}{\Delta x} + \phi_0(t^n) \right].$$

用Taylor展开可以知道它的局部截断误差阶.

等价的简化推导如下: 上述差分方程源于自然边界条件与 $j = 1$ 时差分方程的自然组合, 局部截断误差分别是

$$\begin{aligned} \tau_{pde} &= O((\Delta x)^2 + \Delta t), \\ \tau_{bry} &= -a \frac{[u]_1^n - [u]_0^n}{\Delta x} + \sigma [u]_0^n - \phi_0(t^n) = O(\Delta x). \end{aligned}$$

对第二条式子两边乘 $\frac{a}{(\Delta x)(a + \sigma \Delta x)}$, 两式相加, 即可消去 u_0^n , 得到 $\tau_1^n = O(1)$. 这样, 全显格式在 x_1 处的差分方

程不相容. □

提高边界导数离散的相容阶的方法可以是: **扩大模板宽度**, 比如

$$[u_x]_0^n = \frac{1}{2\Delta x} [-[u]_2^n + 4[u]_1^n - 3[u]_0^n] + O(\Delta x)^2,$$

或者采用**双侧离散方式**(下一小节).

下面再看稳定性. 由偏微分方程理论, 原问题(HX)的最大模和 L^2 模都是不增的, 相应数值格式是否有类似结论?

定理 4.7.2 (Gershgorin第一圆盘定理) 下列复平面中 n 个圆盘 D_i 的并

$$D_i = \{x \in \mathbb{C} : |z - a_{ii}| \leq \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|\}$$

包含 $n \times n$ 矩阵 A 的谱 (即特征值集) .

证明: 设 λ 是 A 的谱中任意元, 选择一个向量 x , 使得 $Ax = \lambda x$, 且 $\|x\|_\infty = 1$. 设 i 是 $|x_i| = 1$ 的一个指标. 因为 $(Ax)_i = \lambda x_i$, 所以

$$\lambda x_i = \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j, \Rightarrow (\lambda - a_{ii}) x_i = \sum_{j=1, j \neq i}^n a_{ij} x_j.$$

则

$$|\lambda - a_{ii}| \leq \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}| |x_j| \leq \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|,$$

因此 $\lambda \in D$. □

定理 4.7.3 基于单侧边界离散方式的全显格式在 $2\mu a \leq 1$ 时有最大模稳定性和 L^2 模稳定性.

证明: 当 $2\mu a \leq 1$ 时, 矩阵 A 的元素非负, 且每行元素之和不超过1, 满足离散最大模原理, 从而有最大模稳定性.

当 $2\mu a \leq 1$ 时, 由圆盘定理, A 的谱半径一致不超过1, 则全显格式有 L^2 模稳定性. □

注: 类似可以证明全隐格式无条件具有最大模稳定性和 L^2 模稳定性.

4.7.2 双侧离散方式

1. 虚拟点方法(ghost point method)

自然边界点需要设置为空间网格点. 与单侧离散方式相比, 空间网格需要拓展, 增加少量的辅助网格点. 设空间网格是

$$T_{\Delta x}^{(2)} = \{x_j = j\Delta x\}_{j=-1}^J.$$

其中 $\Delta x = 1/J$ 是空间步长, 而辅助网格点 x_{-1} 在计算区域外.

本质边界条件的差分方程依旧是

$$u_J^n = \phi_1(t^n).$$

而自然边界条件的差分方程变为

$$-a \frac{u_1^n - u_{-1}^n}{2\Delta x} + \sigma u_0^n = \phi_0(t^n).$$

它有二阶相容性.

如果热传导方程扩展到区域外侧, 把 x_0 也看作空间内点, 这样显式离散差分方程为

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \mu a \delta_x^2 u_j^n, j = 0 : J - 1.$$

上面三条式子就构成了(HX)的全显格式.

注：虚拟网格方法得到的格式在 $j = 0$ 处的格式是

$$u_0^{n+1} = (1 - 2\mu(a + \sigma\Delta x))u_0^n + 2\mu au_1^n + 2\mu\Delta x\phi_0(t^n).$$

局部截断误差是 $O(\Delta x + \Delta t)$. 而最大模稳定性的条件是 $2\mu(a + \sigma\Delta x) \leq 1$ (在自然边界条件处) 与 $2\mu a \leq 1$ (在内部点) 的交集, 即 $2\mu(a + \sigma\Delta x) \leq 1$. 当 $\sigma > 0$ 时, 时空约束条件是 $2\mu a < 1$ 且 Δx 需要足够小, 比原来的全显格式需要加强.

2. 半网格方法

在这个方法中, 自然边界点设置在空间网格点的正中间, 而本质边界点 $x = 1$ 也是网格点. 把等距空间网格定义为

$$T_{\Delta x}^{(3)} = \left\{ x_{j-\frac{1}{2}} = \left(j - \frac{1}{2} \right) \Delta x \right\}_{j=0}^{J+1},$$

其中 J 是给定正常数, $\Delta x = \frac{2}{2J+1}$ 是空间步长.

注：空间网格点用整点编号也是可以的, 只是个记号问题.

本质边界条件的差分方程是

$$u_{J+\frac{1}{2}}^n = \phi_1(t^n),$$

而自然边界条件的差分方程定义为

$$-\frac{a}{\Delta x} \left(u_{\frac{1}{2}}^n - u_{-\frac{1}{2}}^n \right) + \frac{\sigma}{2} \left(u_{-\frac{1}{2}}^n + u_{\frac{1}{2}}^n \right) = \phi_0(t^n).$$

与虚拟网格法相比, 这个离散模板更加紧凑.

把 $u_{-\frac{1}{2}}^n$ 看作虚拟点, $u_{\frac{1}{2}}^n$ 看作空间内点, 则有显式离散的差分方程

$$u_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} = u_{j+\frac{1}{2}}^n + \mu a \delta_x^2 u_{j+\frac{1}{2}}^n, j = 0 : J-1.$$

上面三条式子就构成了 (HX) 的全显格式.

注：半网格方法得到的格式在 $j = 0$ 处的格式是

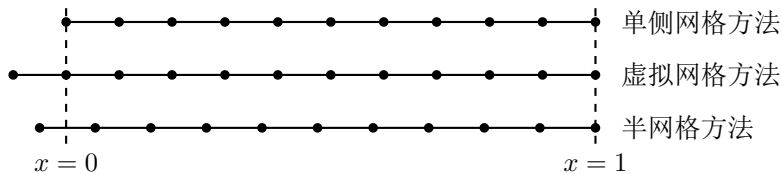
$$u_{\frac{1}{2}}^{n+1} = \left(1 - \mu a \frac{2a + 3\sigma\Delta x}{2a + \sigma\Delta x} \right) u_{\frac{1}{2}}^n + \mu a u_{\frac{3}{2}}^n + \frac{2\mu a \Delta x \phi_0(t^n)}{2a + \sigma\Delta x}.$$

类似前面论证可知这个差分方程自然边界条件处的局部截断误差是 $O(\Delta x + \Delta t)$.

当 Δx 充分小使得 $\sigma\Delta x \leq 2a$ 时, 约束条件 $2\mu a \leq 1$ 可以保证差分方程右端系数非负, 从而这个格式是最大模稳定的. 这个约束条件比虚拟点方法好.

注： L^2 模稳定性的分析方法与单侧离散方法一样, 都是用圆盘定理! 有兴趣的同学可以用圆盘定理来验证 L^2 模稳定性, 也可以尝试构造三种边界条件的 CN 格式或者 DF 格式并进行相容性和稳定性分析.

小结：三种离散方式的网格点分别是如下图:



§ 4.8 高维扩散方程的边界条件

下面设 $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ 是有界区域, 研究热传导方程

$$u_t = u_{xx} + u_{yy}, (x, y) \in \Omega$$

的边值问题(HIBVP)的差分方法.

以全隐格式为例介绍Dirichlet边界问题与Neumann边界条件的数值离散方法; 其他格式是类似的.

4.8.1 矩形区域

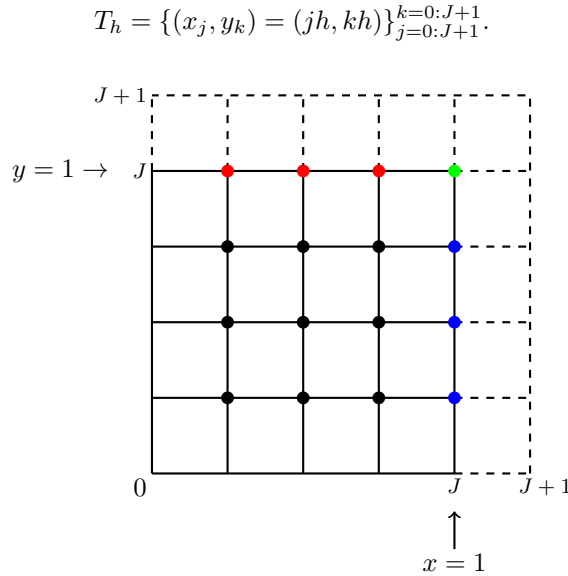
最简单的二维有界区域是矩形区域, 四条边平行于空间坐标轴. 一维问题的边界离散技巧都可以沿用, 沿着不同方向可以构造同边界条件匹配的两个一维空间网格.

例 4.8.1 设 $\Omega = (0, 1)^2$, 初边值问题的边界条件为:

$$\begin{aligned} x = 0 : u &= 0 \\ y = 1 : u_y &= 0 \\ x = 1 : u_x + u &= 0 \\ y = 0 : u &= 0 \end{aligned}$$

用虚拟网格方法处理自然边界条件, 给出相应全隐格式.

解: 为简单起见, 考虑正方形结构空间网格, 设 J 是给定正整数, 定义 $h = \Delta x = \Delta y = 1/J$, 构造二维空间网格



(1) 在内部网格点(黑色点), 热传导方程的全隐格式基本结构是:

$$(1 + 4\mu)u_{jk}^{n+1} - \mu \left[u_{j-1,k}^{n+1} + u_{j+1,k}^{n+1} + u_{j,k-1}^{n+1} + u_{j,k+1}^{n+1} \right] = u_{jk}^n. \quad (*)$$

其中, 网比 $\mu = \frac{\Delta t}{h^2}$, Δt 是时间步长.

(2) 在上方网格点(红色点) $\{(x_j, y_J)\}_{j=1:J-1}$, 边界条件离散为

$$u_y \approx \frac{u_{j,J+1}^{n+1} - u_{j,J-1}^{n+1}}{2h} = 0,$$

即

$$u_{j,J+1}^{n+1} = u_{j,J-1}^{n+1}.$$

代入(*)可得

$$(1 + 4\mu)u_{j,J}^{n+1} - \mu \left[u_{j-1,J}^{n+1} + u_{j+1,J}^{n+1} + 2u_{j,J-1}^{n+1} \right] = u_{j,J}^n.$$

(3)在右侧网格点(蓝色点) $\{(x_J, y_k)\}_{k=1:J-1}$, 边界条件离散为

$$u_x + u \approx \frac{u_{J+1,k}^{n+1} - u_{J-1,k}^{n+1}}{2h} + u_{J,k}^{n+1} = 0.$$

代入(*)可得

$$(1 + 4\mu + 2\mu h)u_{J,k}^{n+1} = \mu \left[2u_{J-1,k}^{n+1} + u_{J,k-1}^{n+1} + u_{J,k+1}^{n+1} \right] = u_{J,k}^n.$$

(4)在右上角的点(绿色) (x_J, y_J) 处, 有两个自然边界条件(即(2)(3)中的边界条件离散), 代入(*)可得

$$(1 + 4\mu + 2\mu h)u_{J,J}^{n+1} - \mu \left[2u_{J-1,J}^{n+1} + 2u_{J,J-1}^{n+1} \right] = u_{J,J}^n.$$

(5)Dirichlet边界条件都赋值为0, 即

$$u_{j,0}^{n+1} = u_{0,k}^{n+1} = 0, j = 0 : J; k = 0 : J.$$

结合(1)-(5)就建立了全隐格式, 可以变成一个形如下式的大规模的线性方程组

$$\mathbf{A}\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{F}^n.$$

其中, \mathbf{u}^{n+1} 是二维网格函数 $\{u_{j,k}^{n+1}\}_{j=1:J}^{k=1:J}$ 按某种方式排列而成的 J^2 维向量. 这里采用先行后列(从左到右、从下到上)的逐行编号方式, 此时

$$\mathbf{u}^{n+1} = \left[(\mathbf{u}_1^{n+1})^T, (\mathbf{u}_2^{n+1})^T, \dots, (\mathbf{u}_{J-1}^{n+1})^T, (\mathbf{u}_J^{n+1})^T \right]^T.$$

其中

$$\mathbf{u}_k^{n+1} = \left[u_{1,k}^{n+1}, u_{2,k}^{n+1}, \dots, u_{J,k}^{n+1} \right]^T.$$

注意如果直接把(1)-(5)汇总成线性方程组, 矩阵 \mathbf{A} 是不对称的! 为了提高效率, 保证系数矩阵的对称性, 需要进行对称处理. 只要差分方程与自然边界条件有关, 则差分方程按 J 出现的次数乘以一个因子 $1/2$. 此时,

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbb{B}_0 & \mathbb{B}_1 & & & \\ \mathbb{B}_1 & \mathbb{B}_0 & \mathbb{B}_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \mathbb{B}_1 & \mathbb{B}_0 & \mathbb{B}_1 \\ & & & \mathbb{B}_1 & \frac{1}{2}\mathbb{B}_0 \end{pmatrix},$$

右端向量是

$$\mathbf{F}^n = \left[(\tilde{\mathbf{u}}_1^n)^T, (\tilde{\mathbf{u}}_2^n)^T, \dots, (\tilde{\mathbf{u}}_{J-1}^n)^T, \frac{1}{2}(\tilde{\mathbf{u}}_J^n)^T \right]^T.$$

其中

$$\mathbb{B}_0 = \begin{pmatrix} 1 + 4\mu & -\mu & & & \\ -\mu & 1 + 4\mu & -\mu & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -\mu & 1 + 4\mu & -\mu \\ & & & -\mu & \frac{1}{2}(1 + 4\mu + 2\mu h) \end{pmatrix}$$

$$\mathbb{B}_1 = \text{diag}(-\mu, -\mu, \dots, -\mu, -\mu/2).$$

$$\tilde{\mathbf{u}}_k^n = \left[u_{1,k}^n, u_{2,k}^n, \dots, u_{J-1,k}^n, \frac{1}{2}u_{J,k}^n \right]^T.$$

作业: 用半网格方法构造(HIBVP)的全隐格式?

4.8.2 任意区域

任意区域难以构造完美的空间网格, 设计网格需要耗费大量时间和精力, 所以先跳过这个讨论, 直接把注意力集中在边界条件的数值离散方法, 即用二维平面的正方形网格

$$M_h = \{(x_j, y_k) : x_j = x_0 + jh, y_k = y_0 + kh\}_{j=-\infty:+\infty, k=-\infty:+\infty}.$$

关于 Ω 的裁剪, 并给出相应的离散网格

$$\bar{\Omega}_h = \Omega_h \cup \Gamma_h.$$

它们的定义如下:

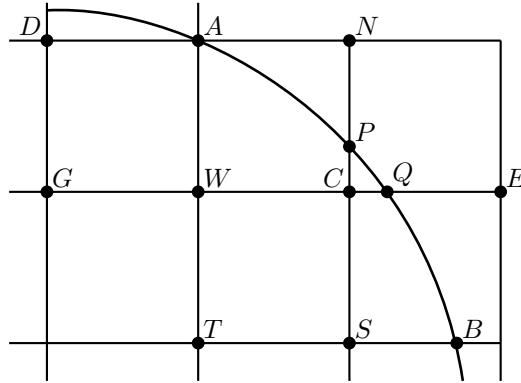
- **网格内点:** 若 M_h 的网格点落在 Ω 内, 就称这个网格点是内点, 网格内点的全体是 Ω_h .
- **规则内点:** 若某个内点的差分方程与边界信息无关, 则称之为规则内点, 否则称为非规则内点.
- **网格边界点:** M_h 的网格线与边界 $\partial\Omega$ 的交点叫网格边界点. 网格边界点的全体构成网格边界点集 Γ_h . (网格边界点不一定是网格点)

如下图, \widehat{APQB} 是边界曲线, A, B, P, Q 是网格边界点; G, T, W, C, S 是网格内点; 用全隐格式离散偏微分方程时, G, T 是规则内点, W, C, S 是非规则内点.

设

$$|CQ| = s_1 h, |CP| = s_2 h, |CW| = s_3 h, |CS| = s_4 h.$$

这里, $s_1 < 1, s_2 < 1$ 对应网格边界点, $s_3 = s_4 = 1$ 对应网格内点.



4.8.3 本质边界条件的离散

考虑Dirichlet边界条件

$$u|_{\widehat{APQB}} = g(x, y).$$

其中 g 是已知边界函数. 为了方便, 设 g 与时间无关(与时间有关的情形是类似的).

在非规则内点 W 处, 相邻网格边界点 A 也是网格点, 边界条件离散非常简单, 直接代入已知边界条件即可:

$$-\mu(u_G^{n+1} + u_C^{n+1} + u_T^{n+1}) + (1 + 4\mu)u_W^{n+1} = u_W^n + \mu g(A).$$

在非规则内点 C 处相邻两个边界点 P, Q 不是网格点, 边界条件变复杂了. 常见实现策略有:

1. **简单迁移:** 把最靠近的边界点信息直接迁移到非规则内点上. 这个离散过程与偏微分方程无关.

(1)常值延拓: 最靠近非规则内点 C 的网格边界点是 Q . 定义

$$u_C^{n+1} = u_Q^{n+1} = g(Q).$$

可以证明误差 $[u]_C^{n+1} - g(Q) = O(h)$.

(2)线性插值: 用Q,W两点作线性插值, 定义

$$u_C^{n+1} = \frac{s_1}{s_1 + s_3} u_W^{n+1} + \frac{s_3}{s_1 + s_3} g(Q).$$

可以证明误差 $[u]_C^{n+1} - \frac{s_1}{s_1 + s_3} [u]_W^{n+1} - \frac{s_3}{s_1 + s_3} g(Q) = O(h^2)$.

2. 非等臂长: 把附近的网格边界点都收录到非规则内点的离散模板.

在C处周围的W,Q,P,S离散二阶导数可得

$$\begin{aligned} [u_{xx}]_C^{n+1} &\approx \frac{1}{\frac{1}{2}(s_1 + s_3)h} \left[\frac{[u]_Q - [u]_C}{s_1 h} - \frac{[u]_C - [u]_W}{s_3 h} \right] \\ [u_{yy}]_C^{n+1} &\approx \frac{1}{\frac{1}{2}(s_2 + s_4)h} \left[\frac{[u]_Q - [u]_C}{s_2 h} - \frac{[u]_C - [u]_W}{s_4 h} \right] \end{aligned}$$

时间方向离散为

$$[u_t]_C^{n+1} \approx \frac{1}{\Delta t} ([u]_C^{n+1} - [u]_C^n).$$

于是非等臂长的全隐格式为

$$u_C^{n+1} - u_C^n = \mu \sum_{\# \in \{Q,P,W,S\}} \beta_{\#} (u_{\#}^{n+1} - u_C^{n+1}),$$

其中 $u_P^{n+1} = g(P)$, $u_Q^{n+1} = g(Q)$, 且

$$\beta_Q = \frac{2}{s_1(s_1 + s_3)}, \beta_P = \frac{2}{s_2(s_2 + s_4)}, \beta_W = \frac{2}{s_3(s_1 + s_3)}, \beta_S = \frac{2}{s_4(s_2 + s_4)}.$$

由Taylor展开可知这样的差分格式相容阶是(1,1,1). (注意 $s_1 \neq 1, s_2 \neq 1$) 非规则内点会让相容性变差.

注意此时的系数矩阵不对称, 如果需要对系数矩阵对称, 则要修正 $\beta_{\#}$ 系数, 重新定义非等臂长全隐格式. 一个修正方式为

$$\beta_Q = \frac{1}{s_1 s_3}, \beta_P = \frac{1}{s_2 s_4}, \beta_W = \frac{1}{s_3^2}, \beta_S = \frac{1}{s_4^2}.$$

但这样得到的差分方程不相容于二维热传导方程, 空间方向局部截断误差是 $O(1)$ 的.

注: 上述两种边界条件离散不会破坏全隐格式的整体二阶相容, 证明需要用到椭圆型差分格式的强最大值原理.

4.8.4 自然边界条件的离散

下面考虑自然边界条件(Neumann条件)

$$\nabla u \cdot \gamma \Big|_{\widehat{APQB}} = g(x, y).$$

其中, $\gamma = (\gamma_1, \gamma_2)^T$ 是单位外法向量, 为了方便, 设 g 与时间无关.

在非规则内点W处, 相邻网格边界点A是网格点. 边界条件离散用全隐格式为

$$-\mu \left[u_G^{n+1} + u_C^{n+1} + u_T^{n+1} + u_A^{n+1} \right] + (1 + 4\mu) u_W^{n+1} = u_W^n.$$

用单侧离散技术, 可得自然边界条件的差分离散:

$$\gamma_1 \left[u_A^{n+1} - u_D^{n+1} \right] + \gamma_2 \left[u_A^{n+1} - u_W^{n+1} \right] = h g(A).$$

联立两式消去 u_A^{n+1} 即可得到W的差分方程.

在非规则内点C处, 边界条件离散会很繁琐. 有两种策略:

1. 简单迁移

(3)差商离散导数. 上式中,

$$\begin{aligned} LHS &\approx \text{Area}(\triangle HKG)[u_t]_C^{n+1} \approx \text{Area}(\triangle HKG) \frac{[u]_C^{n+1} - [u]_C^n}{\Delta t}. \\ RHS &\approx -\frac{[u]_C^{n+1} - [u]_W^{n+1}}{\Delta x} |HK| - \frac{[u]_C^{n+1} - [u]_S^{n+1}}{\Delta y} |KG| + \int_{\widehat{HPQG}} g(x, y) dS. \end{aligned}$$

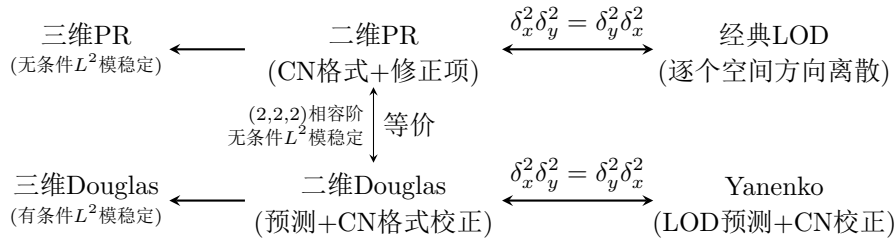
最后的曲线积分可以用数值积分去算.

把(1)-(3)联立, 略去无穷小量, 用数值解代替真解即可得到C的差分方程.

注: 把Dirichlet边界条件与Neumann边界条件离散方法结合起来可以得到Robin边界条件的数值离散方法.

§ 4.9 ADI方法与LOD方法

ADI(交替方向隐式)方法和LOD(局部一维化)方法都是**算子分裂方法**. 它们都是把二维差分格式近似转化为一组具有一维求解属性的二维差分格式, 使得单步时间推进效率显著提升.



4.9.1 Peaceman-Rachford格式

Peaceman和Rachford在模拟石油贮藏模型时, 为了改善CN格式(下面省去空间下标)

$$u^{n+1} = u^n + \frac{1}{2}\mu_x a \delta_x^2 (u^n + u^{n+1}) + \frac{1}{2}\mu_y b \delta_y^2 (u^n + u^{n+1})$$

在等号右边加上修正项 $\frac{1}{4}\mu_x \mu_y a b \delta_x^2 \delta_y^2 (u^n - u^{n+1})$, 得到下面的漂亮形式

$$\left[\mathbb{I} - \frac{1}{2}\mu_x a \delta_x^2 \right] \left[\mathbb{I} - \frac{1}{2}\mu_y b \delta_y^2 \right] u^{n+1} = \left[\mathbb{I} + \frac{1}{2}\mu_x a \delta_x^2 \right] \left[\mathbb{I} + \frac{1}{2}\mu_y b \delta_y^2 \right] u^n.$$

它保持了(2,2,2)阶局部截断误差:

$$\tau_{jk}^n \approx \frac{1}{24}(\Delta t)^2 u_{ttt} - \frac{1}{12}(\Delta x)^2 u_{xxxx} - \frac{1}{12}(\Delta y)^2 u_{yyyy} - \frac{1}{8}(\Delta t)^2 u_{xtt} - \frac{1}{8}(\Delta t)^2 u_{yxt} + \frac{1}{4}(\Delta t)^2 u_{xyyt}.$$

引进辅助网格函数 $u^{n+1/2}$, 计算过程可以分裂为两个计算步骤, 即为PR格式.

$$\left[\mathbb{I} - \frac{1}{2}\mu_x a \delta_x^2 \right] u^{n+1/2} = \left[\mathbb{I} + \frac{1}{2}\mu_y b \delta_y^2 \right] u^n. \quad (1)$$

$$\left[\mathbb{I} - \frac{1}{2}\mu_y b \delta_y^2 \right] u^{n+1} = \left[\mathbb{I} + \frac{1}{2}\mu_x a \delta_x^2 \right] u^{n+1/2}. \quad (2)$$

(1)式可以视为 $t^n \rightarrow t^{n+1/2}$ 的计算过程, x 方向的导数离散采用全隐方式, y 方向的导数离散采用全显方式, 相应的时间推进距离是 $\frac{\Delta t}{2}$.

(2)式可视为 $t^{n+1/2} \rightarrow t^{n+1}$ 的计算过程, 其中 x 方向的导数离散用全显方式, y 方向的导数离散用全隐方式, 相应的时间推进距离是 $\frac{\Delta t}{2}$.

因此, PR格式又叫ADI(alternative direction implicit)方法.

由Fourier方法,

$$\lambda(l_1, l_2) = \frac{1 - 2\mu_x a \sin^2 \frac{l_1 \Delta x}{2}}{1 + 2\mu_x a \sin^2 \frac{l_1 \Delta x}{2}} \cdot \frac{1 - 2\mu_y b \sin^2 \frac{l_2 \Delta y}{2}}{1 + 2\mu_y b \sin^2 \frac{l_2 \Delta y}{2}},$$

显然 $|\lambda| < 1$, 则PR格式无条件 L^2 模稳定.

再看最大模稳定性. 把(1)改写为

$$(1 + \mu_x a)u_{jk}^{n+1/2} = (1 - \mu_y b)u_{jk}^n + \frac{1}{2}\mu_y b(u_{j,k-1}^n + u_{j,k+1}^n) + \frac{1}{2}\mu_x a(u_{j+1,k}^{n+1/2} + u_{j-1,k}^{n+1/2}).$$

当 $\mu_y b \leq 1$ 时, 所有系数都非负, 满足离散最大模原理. 同理改写(2)可知当 $\mu_x a \leq 1$ 时满足离散最大模原理. 因此最大模稳定性条件是

$$\max\{\mu_x a, \mu_y b\} \leq 1.$$

计算效率分析: 略.

4.9.2 Douglas格式

PR格式的计算效率很高, 受此启发, 许多ADI格式被相继提出. 二维Douglas格式为

$$\begin{aligned} u^{n+\frac{1}{2}} - u^n &= \mu_x a \delta_x^2 \frac{u^{n+\frac{1}{2}} + u^n}{2} + \mu_y b \delta_y^2 u^n, \\ u^{n+1} - u^n &= \mu_x a \delta_x^2 \frac{u^{n+\frac{1}{2}} + u^n}{2} + \mu_y b \delta_y^2 \frac{u^n + u^{n+1}}{2}. \end{aligned}$$

第一步是“预测”(得到 $[u]^{n+1}$ 的一阶逼近 $u^{n+1/2}$), 第二步是基于二维CN格式的“校正”(给出二阶时间逼近 u^{n+1}), 它们分别对应逐行扫描与逐列扫描, 计算效率与二维PR格式一样.

Douglas格式的结构: 非当前空间方向的CN型离散都用已有信息或者预测信息进行替换, 且当前空间方向的CN型离散一旦出现后, 其离散结构将保持不变.

消去 $u^{n+1/2}$, 可以推出Douglas格式与PR格式等价!

注: 与二维PR格式相比, 二维Douglas格式需要额外的存储空间来记录辅助网格函数信息, 没有任何数值优势. 但是如果推广到三维, 会有不一样的结论.

注: 下面的Douglas-Rachford(DR)格式也属于预测校正方法, 相容阶是(2,2,1).

$$\begin{aligned} u^{n+\frac{1}{2}} - u^n &= \mu_x a \delta_x^2 u^{n+\frac{1}{2}} + \mu_y b \delta_y^2 u^n, \\ u^{n+1} - u^{n+\frac{1}{2}} &= \mu_x a \delta_x^2 u^{n+\frac{1}{2}} + \mu_y b \delta_y^2 u^{n+1}, \end{aligned}$$

Douglas格式基于二维CN格式进行ADI策略, 而DR格式是基于二维全隐格式实现ADI策略.

4.9.3 三维ADI格式

三维扩散方程

$$u_t = au_{xx} + bu_{yy} + cu_{zz}$$

其中 $a, b, c > 0$, 时空网格 $T_{\Delta x, \Delta y, \Delta z, \Delta t}$ 等距, 网比分别为 μ_x, μ_y, μ_z .

仿照二维PR格式, 构造三维PR格式: 时间推进化为三个不同方式, 当前空间方向的导数离散采用全隐方式, 而其他空间方向用全显方式, 得到三维PR格式:

$$\begin{aligned} u^{n+\frac{1}{3}} - u^n &= \frac{1}{3}\mu_x a \delta_x^2 u^{n+\frac{1}{3}} + \frac{1}{3}\mu_y b \delta_y^2 u^n + \frac{1}{3}\mu_z c \delta_z^2 u^n \\ u^{n+\frac{2}{3}} - u^{n+\frac{1}{3}} &= \frac{1}{3}\mu_x a \delta_x^2 u^{n+\frac{1}{3}} + \frac{1}{3}\mu_y b \delta_y^2 u^{n+\frac{2}{3}} + \frac{1}{3}\mu_z c \delta_z^2 u^{n+\frac{1}{3}} \\ u^{n+1} - u^{n+\frac{2}{3}} &= \frac{1}{3}\mu_x a \delta_x^2 u^{n+\frac{2}{3}} + \frac{1}{3}\mu_y b \delta_y^2 u^{n+\frac{2}{3}} + \frac{1}{3}\mu_z c \delta_z^2 u^{n+1} \end{aligned}$$

仿照二维Douglas格式, 基于三维CN格式的预测校正过程, 得到三维Douglas格式(又叫Douglas-Gunn格式):

$$\begin{aligned} u^{n+\frac{1}{3}} - u^n &= \mu_x a \delta_x^2 \hat{u}^{n+\frac{1}{3}} + \mu_y b \delta_y^2 u^n + \mu_z c \delta_z^2 u^n, \\ u^{n+\frac{2}{3}} - u^n &= \mu_x a \delta_x^2 \hat{u}^{n+\frac{1}{3}} + \mu_y b \delta_y^2 \hat{u}^{n+\frac{2}{3}} + \mu_z c \delta_z^2 u^n, \\ u^{n+1} - u^n &= \mu_x a \delta_x^2 \hat{u}^{n+\frac{1}{3}} + \mu_y b \delta_y^2 \hat{u}^{n+\frac{2}{3}} + \mu_z c \delta_z^2 \hat{u}^{n+1}, \end{aligned}$$

用Fourier方法可证明: 三维Douglas格式无条件 L^2 模稳定, 而三维PR格式有条件稳定, 因此两个格式是不等价的. 所以三维Douglas格式在稳定性方面有相应数值优势!

4.9.4 LOD方法

LOD方法有扎实的理论基础和物理背景. 以二维热传导的纯初值问题或周期边值问题为例, 设时间区间是 $[0, T]$, 给定正整数 N , 构造等距离散网格

$$T_{\Delta t} = \{t^n = n\Delta t\}_{n=0}^N.$$

其中 $\Delta t = \frac{T}{N}$ 是时间步长.

接下来考虑如下的半离散问题:

$$\left. \begin{aligned} u^{\Delta t}(x, y, 0) &= u(x, y, 0) \\ \frac{1}{2}u_t^{\Delta t} &= au_{xx}^{\Delta t}, t \in (t^n, t^{n+\frac{1}{2}}], \\ \frac{1}{2}u_t^{\Delta t} &= bu_{yy}^{\Delta t}, t \in (t^{n+\frac{1}{2}}, t^{n+1}], \end{aligned} \right\} \quad (*)$$

其中 $n = 0 : N-1$. 用分离变量法可以计算得 $u^{\Delta t}(x, y, T) = u(x, y, T)$.

这个半离散问题可以解读为高维传导的逐维分解过程, 符合物理学的基本定律!

通常把(*)的各种数值格式称为二维热传导方程的LOD格式(逐层一维化格式). 例如, 用CN格式可以得到经典LOD格式:

$$\begin{aligned} \left(\mathbb{I} - \frac{1}{2}\mu_x a \delta_x^2 \right) u^{n+\frac{1}{2}} &= \left(1 + \frac{1}{2}\mu_x a \delta_x^2 \right) u^n, \\ \left(\mathbb{I} - \frac{1}{2}\mu_y b \delta_y^2 \right) u^{n+1} &= \left(1 + \frac{1}{2}\mu_y b \delta_y^2 \right) u^{n+\frac{1}{2}}, \end{aligned}$$

网格函数是二维的, 每一步对应一个方向的扫描过程.

比较PR格式与LOD格式, 可以发现: 如果二阶差分算子是可交换的, 即 $\delta_x^2 \delta_y^2 = \delta_y^2 \delta_x^2$, 则LOD格式与PR格式等价, 无条件具有 L^2 模稳定性与(2,2,2)阶局部截断误差.

LOD方法具有理想的单步时间推进效率, 常常用于预测校正格式的预测值计算. 例如二维扩散方程 $u_t = au_{xx} + bu_{yy}$ 的Yanenko格式是

$$\left. \begin{aligned} u^{n+\frac{1}{4}} &= u^n + \frac{1}{2}\mu_x a \delta_x^2 u^{n+\frac{1}{4}}, \\ u^{n+\frac{1}{2}} &= u^{n+\frac{1}{4}} + \frac{1}{4}\mu_y b \delta_y^2 u^{n+\frac{1}{2}}, \end{aligned} \right\} \text{LOD方法预测, 时间一阶}$$

$$u^{n+1} = u^n + \mu_x a \delta_x^2 u^{n+\frac{1}{2}} + \mu_y b \delta_y^2 u^{n+\frac{1}{2}}, \quad (\text{校正, 时间二阶, 可显式计算})$$

如果二阶差分算子是可交换的, 即 $\delta_x^2 \delta_y^2 = \delta_y^2 \delta_x^2$, 则Yanenko格式与二维Douglas格式(或PR)格式等价.

第5章 对流方程

下面转为考虑双曲型方程(hyperbolic)差分方法. 与抛物型方程相比, 双曲线方程缺乏耗散机制, 相应数值困难更为突出.

对流方程 $\left\{ \begin{array}{l} \text{特征线理论: 在特征线上真解 } u \text{ 是常值.} \\ \text{CFL条件: 偏微分方程的依赖区域位于数值格式的依赖区域, 是相容格式稳定的必要条件.} \end{array} \right.$

常系数对流方程	迎风格式	$\left\{ \begin{array}{l} \text{构造方法: 低阶相容的单侧差商离散、特征线法} \\ \text{相容阶: } (1,1) \\ \text{最大模稳定性条件: } \nu a \leq 1 \\ \text{L}^2 \text{模稳定性条件}(a > 0 \text{时}): } 0 < \nu a \leq 1 \end{array} \right.$
	LW格式	$\left\{ \begin{array}{l} \text{构造方法: 时间Taylor法、待定系数法、特征线法等} \\ \text{相容阶: } (2,2) \\ \text{最大模稳定性条件: } \nu a = 1 \\ \text{L}^2 \text{模稳定性条件: } \nu a \leq 1 \end{array} \right.$
	Lax格式	$\left\{ \begin{array}{l} \text{构造方法: 中心差商显格式 } u_j^n \text{ 两侧算术平均、特征线法} \\ \text{相容阶: 有条件相容, } \nu \text{ 为常数时具有整体一阶相容} \\ \text{最大模稳定性条件: } \nu a \leq 1 \\ \text{L}^2 \text{模稳定性条件: } \nu a \leq 1 \end{array} \right.$
	蛙跳格式	$\left\{ \begin{array}{l} \text{构造方法: 中心差商离散时间导数与空间导数} \\ \text{相容阶: } (2,2) \\ \text{最大模稳定性条件: 无条件不稳定} \\ \text{L}^2 \text{模稳定性条件(充要): } \nu a < 1 \end{array} \right.$
	盒子格式	$\left\{ \begin{array}{l} \text{构造方法: 紧凑网格用半步中心差商离散导数, 再用半点网格的算术平均} \\ \text{相容阶: } (2,2) \\ \text{最大模稳定性条件: 无条件不稳定} \\ \text{L}^2 \text{模稳定性条件: 无条件稳定} \end{array} \right.$

§ 5.1 对流方程的特征线

考虑最简单的对流方程

$$u_t + a(x, t)u_x = 0$$

的纯初值问题或周期边值问题, 初值为 $u(x, 0) = u_0(x)$.

这个方程的真解可以用特征线理论求出, 在每条特征线上 u 都是常值. 特征线就是下面ODE的所有解:

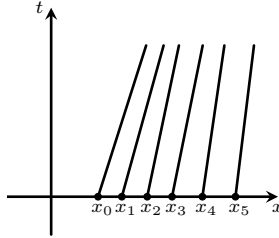
$$\frac{dx}{dt} = a(x, t),$$

在每条特征线上, 解 $u(x, t)$ 满足

$$\frac{du}{dt} = \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{dx}{dt} = 0.$$

利用初值, 可以选择一系列合适的点 x_0, x_1, \dots 并找到通过 $(x_j, 0)$ 的特征线上的数值解, 这个方法就是特征线法.

如果 $a(x, t)$ 关于 x 是Lipshitz函数且关于 t 连续, 则特征线不会相交.



当 a 是常数的时候, 由特征线理论, 真解为

$$u(x, t) = u_0(x - at)$$

特征线为一束平行直线 $x - at \equiv \text{const}$, 是个行波解, 所以双曲线方程的解可以由古典解拓展到间断函数(弱解). 所以我们的差分方法应该尽量做到更好描述间断界面.

对于非线性问题, 如果 $a = a(u)$, 特征线依然都是直线, 因为 u 在每条直线上都是常数, 但是这些特征线不平行. 此时, 解可以写成

$$u(x, t) = u_0(x - a(u(x, t))t).$$

但是此时特征线可能会相交.

§ 5.2 基本格式

设 $T_{\Delta x, \Delta t}$ 是等距时空网格, 其中 $\Delta x, \Delta t$ 分别是时间步长与空间步长, 双曲线方程的网比是 $\nu = \frac{\Delta t}{\Delta x}$. 考虑最简单的情形,

$$u_t + au_x = 0, u(x, 0) = u_0(x)$$

5.2.1 中心差商显格式与迎风格式

向前差商离散时间导数, 用中心差商离散空间导数, 得到

$$u_j^{n+1} - u_j^n = -\frac{1}{2}\nu a(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n).$$

它的相容阶是(2,1), 用Fourier方法可以证明中心差商显格式是无条件 L^2 模不稳定的.

所以我们要舍弃高阶相容, 改为用低阶相容的单侧差商离散, 得到偏心格式:

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \nu a \Delta_{\pm x} u_j^n.$$

对流方程的 a 的符号指明了流动方向. 若 $a > 0$, 则流动从左到右, 左侧是上游方向; 若 $a < 0$, 则流动从右到左, 右侧是上游方向. 因此有下面两种状态的偏心格式:

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \nu a(u_j^n - u_{j-1}^n), \quad a > 0, \text{ (左偏心格式)}$$

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \nu a(u_{j+1}^n - u_j^n), \quad a < 0, \text{ (右偏心格式)}$$

它的相容阶是(1,1). 这两个格式统称为**迎风格式**(upwind scheme), 因为空间方向的离散模板均位于上游方向.

用Fourier方法可以证明迎风格式有条件具有 L^2 模稳定性, 当 $0 < \nu a \leq 1$ 时, 左偏心格式有 L^2 模稳定性; 当 $-1 \leq \nu a < 0$ 时, 右偏心格式有 L^2 模稳定性. 如果偏心方向指向下游, 则偏心格式是无条件不稳定的, 所以迎风格式流动方向的判定是很重要的. 当 $|\nu a| \leq 1$ 时, 迎风格式满足离散最大模原理, 具有最大模稳定性.

5.2.2 Lax-Wendroff格式

对中心差商显格式加修正项 $\frac{1}{2}\nu^2 a^2 \delta_x^2 u_j^n$ 可以得到Lax-Wendroff(LW)格式:

$$u_j^{n+1} = \underbrace{u_j^n - \frac{1}{2}\nu a(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n)}_{\text{中心差商显格式}} + \frac{1}{2}\nu^2 a^2 \delta_x^2 u_j^n.$$

它的构造方法有很多, 比如时间Taylor方法、待定系数法、特征线法、数值黏性修正法等.

例 5.2.1 用时间Taylor方法构造LW格式.

基本思想: 用微分方程把时间导数转化为空间导数.

由Taylor展开,

$$[u]_j^{n+1} = [u]_j^n + \Delta t [u_t]_j^n + \frac{1}{2}(\Delta t)^2 [u_{tt}]_j^n + O(\Delta t)^3.$$

由微分方程可以把时间导数转化为空间导数, 得到

$$\begin{aligned} [u_t]_j^n &= -a[u_x]_j^n = -\frac{a}{2\Delta x}([u]_{j+1}^n - [u]_{j-1}^n) + O((\Delta x)^2), \\ [u_{tt}]_j^n &= a^2[u_{xx}]_j^n = \frac{a^2}{(\Delta x)^2}\delta_x^2[u]_j^n + O((\Delta x)^2). \end{aligned}$$

联立上式

$$[u]_j^{n+1} = [u]_j^n - \frac{\nu a}{2}([u]_{j+1}^n - [u]_{j-1}^n) + \frac{(\nu a)^2}{2}\delta_x^2[u]_j^n + O((\Delta x)^2\Delta t + (\Delta t)^3).$$

略去无穷小量, 用数值解代替真解, 即可得到LW格式. 根据构造过程, LW有相容阶(2,2). □

例 5.2.2 用待定系数法构造LW格式.

我们要构造一个二阶格式. 设

$$u_j^{n+1} = \alpha u_{j-1}^n + \beta u_j^n + \gamma u_{j+1}^n, \alpha, \beta, \gamma \text{ 待定.}$$

由于 $u_t = -au_x$, 当真解充分光滑时, $u_{tt} = -au_{xt} = -au_{tx} = -a(-au_x)_x = a^2u_{xx}$. 由Taylor展开,

$$\begin{aligned} [u]_{j-1}^n &= [u]_j^n - \Delta x [u_x]_j^n + \frac{(\Delta x)^2}{2}[u_{xx}]_j^n - \frac{(\Delta x)^3}{6}[u_{xxx}]_j^n + O(\Delta x)^4, \\ [u]_j^n &= [u]_j^n \\ [u]_{j+1}^n &= [u]_j^n + \Delta x [u_x]_j^n + \frac{(\Delta x)^2}{2}[u_{xx}]_j^n + \frac{(\Delta x)^3}{6}[u_{xxx}]_j^n + O(\Delta x)^4, \\ [u]_j^{n+1} &= [u]_j^n + \Delta t [u_t]_j^n + \frac{(\Delta t)^2}{2}[u_{tt}]_j^n + \frac{(\Delta t)^3}{6}[u_{ttt}]_j^n + O(\Delta t)^4 \\ &= [u]_j^n - a\Delta t [u_x]_j^n + \frac{(a\Delta t)^2}{2}[u_{xx}]_j^n - \frac{(\Delta x)^3}{6}[u_{xxx}]_j^n + O(\Delta t)^4. \end{aligned}$$

比较 $[u]_j^n, [u_x]_j^n, [u_{xx}]_j^n$ 的系数可知

$$\begin{aligned} 1 &= \alpha + \beta + \gamma, \\ -a\Delta t &= -\alpha\Delta x + \gamma\Delta x, \\ \frac{a^2(\Delta t)^2}{2} &= \alpha\frac{(\Delta x)^2}{2} + \gamma\frac{(\Delta x)^2}{2}. \end{aligned}$$

解得

$$\alpha = \frac{\alpha^2 \nu^2 + \alpha \nu}{2}, \beta = 1 - \alpha^2 \nu^2, \gamma = \frac{\alpha^2 \nu^2 - \alpha \nu}{2}.$$

比较 $[u_{xxx}]_j^n$ 系数(LHS-RHS)

$$-\frac{(\Delta x)^3}{6}(1 - \alpha - \gamma) = -\frac{(\Delta x)^3}{6}(1 - \alpha^2 \gamma^2) \neq 0,$$

所以上面的格式不是三阶格式, 而是二阶格式

$$u_j^{n+1} = \frac{\alpha^2 \nu^2 + \alpha \nu}{2} u_{j-1}^n + (1 - \alpha^2 \nu^2) u_j^n + \frac{\alpha^2 \nu^2 - \alpha \nu}{2} u_{j+1}^n,$$

恰好就是Lax-Wendroff格式. □

再看LW格式的稳定性. 用Fourier方法, 当 $|\nu a| \leq 1$ 时LW格式有 L^2 模稳定性, 其稳定性结论与 a 符号无关. 但是当 $0 < |\nu a| < 1$ 时, LW格式出现负系数, 离散最大模原理不成立. 除非 $|\nu a| = 1$, 否则LW格式不具有最大模稳定性.

§ 5.3 CFL条件

Courant, Friedrichs, Lewy在1928年提出了差分方程稳定的CFL条件, 它与**依赖区域**有关. 考虑最简单的情形,

$$u_t + au_x = 0, u(x, 0) = u_0(x)$$

其中 a 是常数, 这个方程的真解为 $u(x, t) = u_0(x - at)$.

下面考虑迎风格式

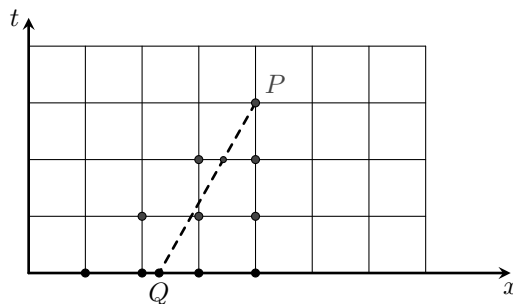
$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} = 0, a > 0.$$

根据这个迎风格式, u_j^{n+1} 的值依赖于 $t = t^n$ 时间层的两个点, 而 $t = t^n$ 时间层的这两个点又依赖于 $t = t^{n-1}$ 时间层的三个点, 最终可以发现 u_j^{n+1} 的值依赖于 $t = 0$ 时刻的点

$$x_{j-n-1}, x_{j-n}, \dots, x_{j-1}, x_j.$$

如果把 u_j^{n+1} 依赖的所有点画在坐标轴上, 这些点构成一个三角形, 把这个三角形叫做迎风格式位于 u_j^{n+1} 处的**依赖区域(domain of dependence)**.

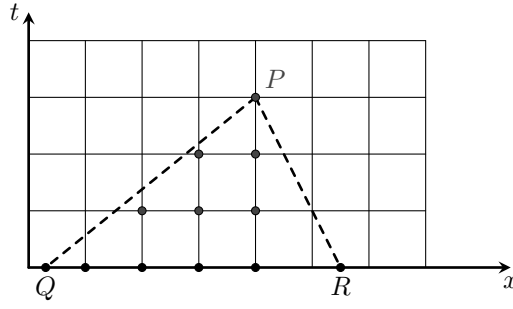
点 $P(x_j, t^{n+1})$ 的真解可以通过画特征线到交点 $Q(x_j - at^{n+1}, 0)$ 得到. 偏微分方程的依赖区域就是特征线段 PQ .



CFL条件指的是说, 偏微分方程的依赖区域位于数值格式的依赖区域中.

如果相容格式具有稳定性, 则必然满足CFL条件.

下图是左偏心格式不满足CFL条件的两个例子. 如果 $a < 0$, 则特征线就是直线 RP , 如果 $a > 0$, 需要对时间步长作约束, 如果要想偏微分方程的特征线位于三角形内, 则需要满足 $\nu a \leq 1$.



注: CFL条件只是相容格式稳定的必要条件. 可以验证, LW格式的CFL条件为 $|\nu a| \leq 1$. 它恰好是Fourier方法的 L^2 模稳定性条件, 但它不满足最大模稳定性.

对于中心差商显格式

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} = 0,$$

当 $|\nu a| \leq 1$ 时, 依然满足CFL条件, 但它是无条件不稳定的.

§ 5.4 其他著名格式

5.4.1 Lax-Friedrichs格式

对中心全显格式作‘算术平均技术’可以得到Lax-Friedrichs(LF)格式(有时也叫Lax格式, 因为Lax把这个推广到了标量方程组)为

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2}(u_{j-1}^n + u_{j+1}^n) - \frac{1}{2}\nu a(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n).$$

(回顾热传导方程Richardson格式推出Du Fort-Frenkel格式的方法) 它是有条件相容的,

$$\tau_j^n = O\left(\Delta t + (\Delta x)^2 + \frac{(\Delta x)^2}{\Delta t}\right).$$

当网比 $\nu = \frac{\Delta t}{\Delta x}$ 固定时, 具有整体一阶局部截断误差.

Lax格式的CFL条件就是 $|\nu a| \leq 1$, 用Fourier方法可以证明它的 L^2 模稳定性充要条件也是 $|\nu a| \leq 1$. 如果CFL条件满足, 则Lax格式具有最大模稳定性.

例 5.4.1 Lax格式可以用特征线方法与插值法结合来构造.

用特征线理论, 对流方程的真解满足(第 $n+1$ 时间层与第 n 个时间层的关系式)

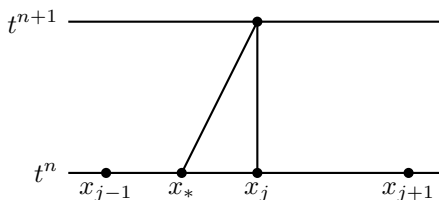
$$[u]_j^{n+1} \equiv u(x_j, t^{n+1}) = u(x_j - a\Delta t, t^n), \forall j.$$

若 $|\nu a| \leq 1$, 则 $x_j - a\Delta t \in [x_{j-1}, x_{j+1}]$, 我们可以用周边网格信息来近似函数值 $u(x_j - a\Delta t, t^n)$.

基于线性多项式插值, 可得

$$u(x_j - a\Delta t, t^n) = \frac{\Delta x + a\Delta t}{2\Delta x} [u]_{j-1}^n + \frac{\Delta x - a\Delta t}{2\Delta x} [u]_{j+1}^n + O((\Delta x)^2).$$

如下图, $x_* \triangleq x_j - a\Delta t$.



注：上图中 $a > 0$. 如果用 u_{j-1}^n, u_j^n 进行线性插值, 可以得到迎风格式:

$$u_j^{n+1} = u(x_*, t^n) \approx \frac{a\Delta t}{\Delta x} [u]_{j-1}^n + \frac{\Delta x - a\Delta t}{\Delta x} [u]_j^n.$$

如果用 $u_j^n, u_{j-1}^n, u_{j+1}^n$ 进行二次多项式插值, 可以得到Lax-Wendroff格式:

$$\begin{aligned} u(x_*, t^n) &\approx [u]_{j-1}^n \frac{(x_* - x_j)(x_* - x_{j+1})}{(x_{j-1} - x_j)(x_{j-1} - x_{j+1})} + [u]_j^n \frac{(x_* - x_{j-1})(x_* - x_{j+1})}{(x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1})} + [u]_{j+1}^n \frac{(x_* - x_{j-1})(x_* - x_j)}{(x_{j-1} - x_{j+1})(x_j - x_{j+1})} \\ &= [u]_{j-1}^n \frac{\nu a(1 + \nu a)}{2} - [u]_j^n (1 - \nu a)(-1 - \nu a) + [u]_{j+1}^n \frac{(1 - \nu a)(-\nu a)}{2} \\ &= [u]_j^n - \frac{1}{2} \nu a ([u]_{j+1}^n - [u]_{j-1}^n) + \frac{1}{2} \nu^2 a^2 \delta_x^2 [u]_j^n. \end{aligned}$$

5.4.2 蛙跳格式

用中心差商离散时间导数与空间导数得到蛙跳格式(leap-frog scheme):

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t} + a \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} = 0.$$

它是显式三层格式, 无条件具有(2,2)阶局部截断误差.

CFL条件是 $|\nu a| \leq 1$. 但是当 $|\nu a| < 1$ 时, 蛙跳格式具有 L^2 模稳定性. 证明如下:

定义向量型网格函数 $\mathbf{w}^n = (u^n, v^n)^T, v_j^n = u_j^{n-1}$, 则蛙跳格式可以改写为

$$\mathbf{w}_j^{n+1} = \begin{pmatrix} -\nu a & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} (\mathbf{w}_{j+1}^n - \mathbf{w}_{j-1}^n) + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \mathbf{w}_j^n.$$

把模态解 $\mathbf{w}_j^n = \hat{\mathbf{w}}^n e^{ikj\Delta x}$ 代入可得

$$\hat{\mathbf{w}}^{n+1} = \mathbb{G} \hat{\mathbf{w}}^n,$$

其中

$$\mathbb{G} = \begin{pmatrix} -2i\nu a \sin(k\Delta x) & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

是增长矩阵. 它的两个特征值是

$$\lambda_{1,2}(k) = -i\nu a \sin(k\Delta x) \pm \sqrt{1 - \nu^2 a^2 \sin^2(k\Delta x)}.$$

CFL条件成立时, $|\lambda_{1,2}(k)| = 1$, 严格von Neumann条件得到满足, 它是蛙跳格式有 L^2 模稳定性的必要条件.

当 $|\nu a| < 1$ 时, 增长矩阵两个特征值互异. 由Kreiss定理可知蛙跳格式有 L^2 模稳定性.

当 $|\nu a| = 1$ 时, 蛙跳格式不稳定, 以 $\nu a = 1$ 为例, 令 $k\Delta x = -\frac{\pi}{2}$, 则增长矩阵有重特征根 i , 且

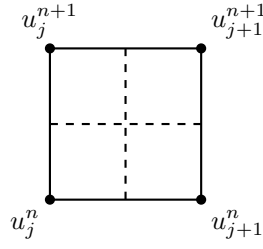
$$\mathbb{G}^n = i^n \begin{pmatrix} n+1 & -ni \\ -ni & 1-n \end{pmatrix}.$$

取 $\mathbf{z} = (1, 0)^T$, 则 $\mathbb{G}^n \mathbf{z} = i^n (n+1, -ni)^T, \|\mathbb{G}^n\|_{2,M} \geq \sqrt{2}n$, 所以蛙跳格式不稳定. \square

蛙跳格式出现负系数, 所以不是最大模稳定的.

5.4.3 盒子格式

在时空网格中取四个紧密相邻的网格点, 形成方盒状的离散模板:



盒子的中心 $(x_{j+\frac{1}{2}}, t^{n+\frac{1}{2}})$ 作为离散焦点, 用半步中心差商离散对流方程的两个导数, 得到

$$\frac{[u]_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} - [u]_{j+\frac{1}{2}}^n}{\Delta t} + a \frac{[u]_{j+1}^{n+\frac{1}{2}} - [u]_j^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} \approx 0.$$

用半点网格的算术平均技术

$$[u]_{j+\frac{1}{2}}^n \approx \frac{[u]_{j+1}^n + [u]_j^n}{2}, [u]_j^{n+\frac{1}{2}} \approx \frac{[u]_j^n + [u]_j^{n+1}}{2}$$

即可得到盒子格式(box scheme)

$$\frac{u_{j+1}^{n+1} - u_{j+1}^n + u_j^{n+1} - u_j^n}{2\Delta t} + a \frac{u_{j+1}^{n+1} - u_j^{n+1} + u_{j+1}^n - u_j^n}{2\Delta x} = 0$$

它具有(2,2)阶局部截断误差.

盒子格式是隐格式, 适用于“带有方向性”的初边值问题数值计算, 例如当 $a > 0$ 时, 最左端的边界网格点信息由已知的入流边界条件确定, 此时用盒子格式的等价表达式

$$u_{j+1}^{n+1} = u_j^n + \frac{1 - \nu a}{1 + \nu a} [u_{j+1}^n - u_j^{n+1}]$$

可以从左到右扫描, 计算过程由隐式变成显式.

盒子格式无条件具有 L^2 模稳定性, 增长因子满足 $|\lambda(k)| = 1$. 由于盒子格式出现负系数, 它不是最大模稳定的.

§ 5.5 几种格式的数值表现

考虑初值函数

$$u_0(x) = \begin{cases} 1, & x \in [0.4, 0.6], \\ e^{-160(x-1.5)^2}, & \text{其他.} \end{cases}$$

同时具有光滑部分与间断部分, 比较迎风格式与LW格式的数值表现.

在真解光滑的区域, 两个格式的数值表现都比较理想, LW格式相容阶更高, 误差更小.

在间断界面附近, 迎风格式的间断界面(也叫数值过渡区域)是平滑的; 但LW格式出现了数值振荡与上下溢出. 即使加密网格也不会得到明显改善. (网格加密后, 数值震荡明显可见的时间仅仅是被推迟了, 不可能消除)

这个例子表明双曲方程的数值困难, 即高阶精度与数值振荡是无法调和的两个对立面. 迎风格式与LW格式各有优缺点, 我们希望构造尽可能保持高阶精度且保持间断面的形态.

下面用Lax格式与迎风格式进行对比. 空间步长 $\Delta x = 0.01$, 网比 $\nu = 0.625$. 根据数值结果, 两个格式捕捉间断界面位置都比较精确. 但是在间断界面附近, Lax格式的数值过渡区域更宽, 峰值下降程度更厉害, 即Lax格式比迎风格式有更强的数值耗散机制.

下面绘制蛙跳格式在不同时刻的数值解. 空间步长 $\Delta x = 0.01$, 网比 $\nu = 0.625$. 第一层初值采用LW格式设置(迎风格式类似). 可以发现: 数值振荡出现在波后, 污染区域(振荡区域)随时间发展而变宽.

下面观察盒子格式的效果, 初值改为

$$u_0(x) = \begin{cases} 1, & x \in [1.25, 1.75], \\ e^{-160(x+0.5)^2}, & \text{其他}. \end{cases}$$

空间步长 $\Delta x = 0.01$, 网比 $\nu = 0.625$. 可以发现, 数值振荡出现在波前, 污染区域随着时间发展而逐渐变宽.

§ 5.6 线性常系数差分格式

$$\left. \begin{array}{l} \text{对流方程} \\ u_j^{n+1} = \sum_{s=-l}^r \alpha_s u_{j+s}^n \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{相容性} \left\{ \begin{array}{l} k\text{阶相容条件: } \tau_j^n \text{的Taylor展开的前}k\text{次项系数为}0 \\ \text{单调格式: } \alpha_s \geq 0. \\ \text{单调保持格式: 若数值初值单调, 则由差分格式得到的数值解单调.} \\ \text{与数值振荡关系: 单调格式} \Leftrightarrow \text{单调保持格式} \Rightarrow \text{数值解不振荡.} \\ \text{Godunov定理: 单调格式的相容阶不超过}1. \end{array} \right. \\ \text{耗散与色散} \left\{ \begin{array}{l} \text{基本概念} \left\{ \begin{array}{l} \text{相位函数} \phi(x, t) = kx + \omega t, \text{波函数} u(x, t) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} e^{i\phi(x, t)} \\ \text{波数} k, \text{相位速度} \omega. \\ \text{波速} c = -\frac{\omega}{k}. c \text{的符号与简谐波传播方向有关.} \end{array} \right. \\ \text{数值耗散} \left\{ \begin{array}{l} |\lambda| > 1: \text{反数值耗散, 振幅膨胀, 格式不稳定.} \\ |\lambda| < 1: \text{数值耗散, 模态解衰减.} \\ |\lambda| = 1: \text{无数值耗散.} \end{array} \right. \\ \text{数值色散} \left\{ \begin{array}{l} \arg \lambda = -\arctan \frac{\text{Im}(\lambda)}{\text{Re}(\lambda)} \\ \text{若} -\frac{\arg \lambda}{\nu a \xi} > 1: \text{数值简谐波在真实简谐波前面.} \\ \text{若} -\frac{\arg \lambda}{\nu a \xi} < 1: \text{数值简谐波在真实简谐波后面.} \end{array} \right. \end{array} \right. \end{array}$$

考虑如下的线性常系数差分格式:

$$u_j^{n+1} = \sum_{s=-l}^r \alpha_s u_{j+s}^n, \forall j \forall n. \quad (*)$$

其中 $\{\alpha_s\}_{s=-l}^r$ 是差分系数, 同格点位置与网格函数无关.

5.6.1 相容性

定理 5.6.1 差分方程(*)与对流方程 $u_t + au_x = 0$ 相容的充要条件是

$$\sum_{s=-l}^r \alpha_s = 1, \sum_{s=-l}^r s \alpha_s = -\nu a.$$

若相容, 则局部截断误差至少为一阶.

证明: 差分方程的局部截断误差是

$$\tau_j^n = \frac{1}{\Delta t} \left\{ [u]_j^{n+1} - \sum_{s=-l}^r \alpha_s [u]_{j+s}^n \right\}.$$

由Taylor展开到二阶项即可证明结论. □

注: 由于对流方程有行波解结构, 差分方程(*)的相容阶有简便的判别方法: 若

$$u_j^n = (x_j - at^n)^l, l = 0, 1, \dots, k$$

均满足差分方程, 则局部截断误差至少达到 k 阶. 所以这个定理也可以改写为

函数1与 $x - at$ 均精确满足差分方程, 则差分方程相容.

例 5.6.1 给出差分方程

$$u_j^{n+1} = \sum_{s=-l}^r \alpha_s u_{j+s}^n, \forall j \forall n$$

达到 k 阶相容的充要条件.

证明: 由Taylor展开到 k 项,

$$\begin{aligned} [u]_{j+s}^n &= [u]_j^n + s\Delta x [D_x u]_j^n + \dots + \frac{(s\Delta x)^k}{k!} [D_x^k u]_j^n + O(\Delta x)^{k+1} \\ [u]_j^{n+1} &= [u]_j^n + \Delta t [D_t u]_j^n + \dots + \frac{(\Delta t)^k}{k!} [D_t^k u]_j^n + O(\Delta t)^{k+1} \\ &= [u]_j^n - a\Delta t [D_x u]_j^n + \dots + \frac{(-a\Delta t)^k}{k!} [D_x^k u]_j^n + O(\Delta t)^{k+1} \end{aligned}$$

由局部截断误差的定义,

$$\begin{aligned} \tau_j^n &= \frac{1}{\Delta t} \left([u]_j^{n+1} - \sum_{s=-l}^r \alpha_s [u]_{j+s}^n \right) \\ &= \frac{1}{\Delta t} \left(\sum_{m=0}^k \frac{(-a\Delta t)^m}{m!} [D_x^m u]_j^n - \sum_{s=-l}^r \alpha_s \sum_{m=0}^k \frac{(s\Delta x)^m}{m!} [D_x^m u]_j^n \right) + O(\Delta x)^{k+1} + O(\Delta t)^k \\ &= \frac{1}{\Delta t} \sum_{m=0}^k \left((-a\Delta t)^m - \sum_{s=-l}^r \alpha_s (s\Delta x)^m \right) \frac{[D_x^m u]_j^n}{m!} + O(\Delta x)^{k+1} + O(\Delta t)^k. \end{aligned}$$

如果要想格式是 k 阶相容的, 只需

$$(-a\Delta t)^m - \sum_{s=-l}^r \alpha_s (s\Delta x)^m = 0, \forall m = 0, 1, \dots, k.$$

化简得

$$\sum_{s=-l}^r s^m \alpha_s = (-a\nu)^m, m = 0, 1, \dots, k.$$

□

5.6.2 单调格式与数值振荡

一个差分格式是**单调保持格式**指: 若数值初值单调, 则由这个差分格式得到的数值解也保持一定的单调性. (否则, 单调性刻画出现错误, 数值振荡随之产生. 所以单调保持性质是数值格式避免数值振荡的前提条件.)

单调格式指差分系数 $\{\alpha_s\}_{s=-l}^r$ 非负.

注: 由前面的相容性定理, 如果一个单调格式是相容格式, 则它具有凸组合的系数结构. 所以相容的单调格式满足离散最大模原理, 具有最大模稳定性! 也可以证明相容的单调格式有 L^2 模稳定性, 后面将会介绍.

定理 5.6.2 单调格式也是单调保持格式, 反之亦然.

证明: 用归纳法证明即可. 逆命题可以考虑用下面的反例证明: 如果数值格式有负系数, 不妨设 $\alpha < m$, 考虑初值

$$u_j^0 = \begin{cases} 0, & j \leq m, \\ 1 & j > m. \end{cases}$$

代入差分方程可得

$$u_1^1 - u_0^1 = \alpha_m < 0.$$

数值解不再保持单增性质, 出现虚假数值振荡. □

定理 5.6.3 (Godunov) 单调格式至多具有一阶局部截断误差.

证明: 设格式是相容的, 由Taylor展开, 局部截断误差为

$$\tau_j^n = \frac{\Delta x}{2\nu} \left[\alpha^2 \nu^2 - \sum_{s=-l}^r s^2 \alpha_s \right] [u_{xx}]_j^n + O((\Delta t)^2 + (\Delta x)^3 / \Delta t).$$

由Cauchy-Schwarz不等式与相容性条件,

$$\alpha^2 \nu^2 = \left[\sum_{s=-l}^r s \alpha_s \right]^2 \leq \sum_{s=-l}^r s^2 \alpha_s \sum_{s=-l}^r \alpha_s = \sum_{s=-l}^r s^2 \alpha_s.$$

等号成立的条件是 $\{\alpha_s\}_{s=-l}^r$ 只有一个非零系数, 但这样的差分方程没有实际价值, 无需考虑. 因此单调格式的局部截断误差至多一阶. □

注: 高阶相容的线性格式必定存在负系数, 数值振荡现象不可避免. 若要建立高阶无振荡格式, 需要跳出单调格式框架, 后面还会介绍TVD格式.

例 5.6.2 LW格式、蛙跳格式、盒子格式都是高阶相容的, 不是单调格式, 由Godunov定理, 数值解会有数值振荡现象.

例 5.6.3 迎风格式与Lax格式都是一阶相容, 在CFL条件下, 它们都是单调格式, 不会出现数值振荡.

5.6.3 数值耗散与数值色散

首先回顾一下Fourier方法.

对流方程 $u_t + au_x = 0$ 的**真解**是 $u(x, t) = e^{i(kx + \omega t)}$ (模态解), 其中 $a > 0, \omega = -ak$. 这个模态解的振幅(amplitude)是不衰减的(undamped), 而一步时间推进以后, 相位(phase)增加了 $\omega \Delta t = -ak \Delta t$.

对流方程的**数值解**形如 $\lambda^n e^{ikj \Delta x}$, 其中 $\lambda(k)$ 是 $k, \Delta t, \Delta x$ 的函数. 一步时间推进以后, 模态解会乘上振幅系数 λ , 它是复的. λ 的模长表示了这个格式是否稳定(数值耗散性质).

- 如果 $|\lambda| > 1 + O(\Delta t)$, 此时数值格式的振幅会膨胀, 出现反数值耗散性质, 则格式不稳定;
- 如果 $|\lambda| < 1$, 则模态解是衰减的(damped), 出现数值耗散现象.
- 如果 $|\lambda| = 1$, 则简谐波振幅保持不变, 此时格式是无耗散的.

把上面的

$$\phi(x, t) = kx + \omega t$$

称为相位函数, k 为波数, ω 为相位速度, $c = -\frac{\phi_t}{\phi_x} = -\frac{\omega}{k}$ 为波速. 若 $c > 0$, 则简谐波从左到右传播; 若 $c < 0$, 则简谐波从右到左传播.

把不同波数 k 的模态解(简谐波)叠加起来得到的整体波形就是原PDE的真解:

$$u(x, t) = \sum_{k \in \mathcal{C}} \frac{A_k}{\sqrt{2\pi}} e^{i(kx + \omega t)}.$$

这里 ω 是与 k 有关的常数: $\omega = \omega(k)$, 它叫**色散关系**(频散关系).

- 如果 $\omega(k)$ 是线性函数, 则各个简谐波的波速 $c = \frac{\omega}{k}$ 相同, 所以整体的波形不变.
- 如果 $\omega(k)$ 不是线性函数, 则不同波数 k 的简谐波有不同的波速 c , 此时整体波形会发生变化, 这样的物理现象叫色散(频散), **dispersion**.

沿着波的传播方向, 位于波面(整体波形的波峰或者波谷或者间断界面)前面的位置叫**波前**, 位于波面后面的位置叫**波后**.

前面指出了, 增长因子的模 $|\lambda(k)|$ 决定了数值格式的耗散性质(稳定性). 而增长因子的幅角 $\arg \lambda = -\arctan \frac{\operatorname{Im}(\lambda)}{\operatorname{Re}(\lambda)}$ 决定了数值色散性质.

数值解的相位与真解的相位的比为

$$\frac{\arg \lambda}{-ak\Delta t} = -\frac{\arg \lambda}{\nu a\xi} \quad (*)$$

其中 $\xi = k\Delta x, \nu = \Delta t/\Delta x$.

- 若 $(*) > 1$, 则数值简谐波超前于真实简谐波;
- 若 $(*) < 1$, 则数值简谐波滞后于真实简谐波.

通常数值相位速度 $\frac{\arg \lambda}{\Delta t}$ 是非线性的, 不同波数 k 的数值简谐波有不同的波速 c , 从而有数值色散现象.

注: 数值色散现象会导致整体波形出现明显变化, 进而产生虚假的数值振荡现象, 如果 $(*) > 1$, 则数值振荡现象出现在波前; 如果 $(*) < 1$, 则数值振荡现象出现在波后.

注: 数值耗散与数值色散是导致数值误差的两个根本原因, 上述分析方法也适用于其他PDE的各种格式.

例 5.6.4 LW格式的数值振荡出现在波后.

答: 设 $\xi = k\Delta x$ 足够小, 由Taylor展开,

$$\arg \lambda(k) = -\arctan \frac{\operatorname{Im}(\lambda(k))}{\operatorname{Re}(\lambda(k))} = -\arctan \frac{\nu a \sin \xi}{1 - 2\nu^2 a^2 \sin^2 \frac{1}{2}\xi} = -\nu a \xi \left[1 - \frac{1}{6}(1 - \nu^2 a^2)\xi^2 + \dots \right].$$

所以数值解的相位与真解相位的比为

$$-\frac{\arg \lambda(k)}{\nu a \xi} = 1 - \frac{1}{6}(1 - \nu^2 a^2)\xi^2 + \dots.$$

由于 $\xi = k\Delta x$ 足够小, 当 $\nu|a| < 1$ 时, 数字1后面的误差项非正, 所以数值速度低于真实速度, 数值振荡出现在波后.

注: 数值色散是数值振荡的根本原因, 数值耗散与数值色散的平衡关系决定数值振荡的具体表现.

例 5.6.5 LW格式的增长因子满足

$$|\lambda(k)| = 1 - \frac{1}{8}\nu^2 a^2(1 - \nu^2 a^2)\xi^4 + \dots,$$

当 $\nu|a| < 1$ 时, LW格式是有耗散的. 但是数值耗散的速度 $O(\xi^4)$ 比数值色散的速度 $O(\xi^2)$ 慢.

我们可以把前面涉及到的五种格式的 $|\lambda(k)|$ 与 $\arg(\lambda)$ 都写出来, 作一个总结:

数值格式	$ \lambda(k) $	$-\frac{\arg(\lambda(k))}{\nu a \xi}$
LW	$1 - \frac{1}{8}\nu^2 a^2(1 - \nu^2 a^2)\xi^4 + \dots$	$1 - \frac{1}{6}(1 - \nu^2 a^2)\xi^2 + \dots$
迎风	$1 - \frac{1}{2}\nu a(1 - \nu a)\xi^2 + \dots$	$1 - \frac{1}{6}(1 - \nu a)(1 - 2\nu a)\xi^2 + \dots$
Lax	$1 - (1 - \nu^2 a^2)\xi^2 + \dots$	$1 + \frac{1}{3}(1 - \nu^2 a^2)\xi^2 + \dots$
蛙跳	1	$1 - \frac{1}{6}(1 - \nu^2 a^2)\xi^2 + \dots$
盒子	1	$1 + \frac{1}{12}(1 - \nu^2 a^2)\xi^2 + \dots$

- 迎风格式与Lax格式都有较强的数值耗散(耗散速度为 $O(\xi^2)$), 而LW格式有弱数值耗散($O(\xi^4)$). 蛙跳格式与盒子格式无数值耗散.
- 迎风格式和Lax格式是单调格式, 所以不会出现数值振荡现象. LW格式、蛙跳格式、盒子格式的阶数为2, 根据Godunov定理, 它们不是单调格式, 必定有数值振荡.
- 当 $|\nu a| < 1$ 时, LW格式、蛙跳格式的数值振荡出现在波后, 而盒子格式的数值振荡出现在波前. (当 $|\nu a| > 1$ 时相反)

例 5.6.6 蛙跳格式的衍生波现象.(待补充)

$$\begin{aligned}
 &\left\{ \begin{array}{l} \text{线性变系数对流方程} \\ \text{一阶双曲方程组} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} \text{格式构造} \left\{ \begin{array}{l} \text{系数冻结法: 迎风格式、Lax格式、蛙跳格式、盒子格式} \\ \text{时间Taylor法: Lax-Wendroff格式, 出现了 } b = aa_x - a_t. \end{array} \right. \\ \text{稳定性分析} \left\{ \begin{array}{l} \text{系数冻结法: CFL条件、} L^2 \text{模稳定性、最大模稳定性} \\ \text{线性不稳定现象: LW格式的 } b = aa_x - a_t \text{ 可能很坏} \\ \text{避免线性不稳定现象: 有耗散格式} \end{array} \right. \end{array} \right. \\
 &\left\{ \begin{array}{l} \text{波动方程} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} \text{格式构造: 特征分解} \left\{ \begin{array}{l} \text{迎风格式: 变系数问题每步都需要特征分解} \\ \text{(通量分裂技术)} \left\{ \begin{array}{l} \text{其他格式: 变系数问题只需要一次特征分解} \end{array} \right. \end{array} \right. \\ \text{稳定性分析} \left\{ \begin{array}{l} \text{Fourier方法或者用标量迎风格式的 } L^2 \text{模稳定性结论} \\ \text{稳定性结论(CFL条件): } \rho(\mathbf{A})\Delta t \leq \Delta x \end{array} \right. \end{array} \right. \\
 &\left\{ \begin{array}{l} \text{波动方程} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} \text{稳定性概念的修正: } \|u^n\|_2 \leq C(1+n) \sum_{m=0}^{p-1} \|u^m\|_2. \\ \text{格式构造} \left\{ \begin{array}{l} \text{直接离散: 中心差商格式, } L^2 \text{模稳定性条件是 } \nu a \leq 1 \\ \text{间接} \left\{ \begin{array}{l} \text{变成一阶双曲方程组} \\ \text{无耗散格式} \left\{ \begin{array}{l} \text{非交错网格盒子格式: 无条件 } L^2 \text{模稳定} \\ \text{非交错网格蛙跳格式: } L^2 \text{模稳定性条件 } \nu a \leq 1 \\ \text{交错网格的蛙跳格式: } L^2 \text{模稳定性条件 } \nu a < 1 \end{array} \right. \end{array} \right. \end{array} \right. \\
 &\left\{ \begin{array}{l} \text{高维对流方程} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} \text{问题: } u_t + au_x + bu_y = 0. \\ \text{真解: } u(x, y, t) = f(x - at, y - bt). \\ \text{格式构造} \left\{ \begin{array}{l} \text{逐维离散: 迎风格式, CFL条件: } |\nu_x a| + |\nu_y b| \leq 1 \\ \text{时间Taylor法: LW格式, 与一维LW格式有区别(混合导数)} \\ \text{算子分裂法(LOD方法).} \end{array} \right. \end{array} \right.
 \end{aligned}$$

§ 5.7 线性变系数对流方程

设 $a(x, t)$ 是连续函数, 考虑线性变系数对流方程

$$u_t + a(x, t)u_x = 0, t > 0.$$

设 x_0 是初始位置, 经过该点的特征线 $x = x(t)$ 满足

$$\frac{dx}{dt} = a(x, t), x(0) = x_0.$$

由不同点出发的特征线互不相交, 且每条特征线上 u 为常数, 所以问题的真解存在唯一(即使初值是间断函数).

下面设 $T_{\Delta x, \Delta t}$ 是等距时空网格, 相应网比 $\nu = \frac{\Delta t}{\Delta x}$.

5.7.1 系数冻结法与时间Taylor法

类似变系数扩散问题, 在离散焦点进行局部系数冻结, 可以得到变系数对流方程的迎风格式:

$$u_j^{n+1} = \begin{cases} u_j^n - \nu a_j^n (u_j^n - u_{j-1}^n), & a_j^n \geq 0, \\ u_j^n - \nu a_j^n (u_{j+1}^n - u_j^n), & a_j^n < 0. \end{cases}$$

用算术平均技术虚化离散焦点得到Lax格式:

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2}(u_{j-1}^n + u_{j+1}^n) - \frac{1}{2}\nu a_j^n (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n).$$

当网比 ν 固定的时候, 两者均具有整体一阶相容性. 但是, 迎风格式需要在所有网格点确定迎风格式, 而Lax格式不需要.

注: 除了LW格式, 前面介绍的其他格式都可以推广到线性变系数问题.

LW格式的构造方法需要用时间方向的Taylor展开式:

$$[u]_j^{n+1} = [u]_j^n + \Delta t [u_t]_j^n + \frac{1}{2}(\Delta t)^2 [u_{tt}]_j^n + O((\Delta t)^3).$$

定义 $b = aa_x - a_t$, 用偏微分方程把时间导数与空间导数互换得到

$$\begin{aligned} [u_t]_j^n &= -a_j^n [u_x]_j^n, \\ [u_{tt}]_j^n &= -(a_t)_j^n [u_x]_j^n + a_j^n [(au_x)_x]_j^n = b_j^n [u_x]_j^n + (a_j^n)^2 [u_{xx}]_j^n. \end{aligned}$$

用中心差商离散两个导数, 可得变系数问题的LW格式:

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\nu}{2} \left[a_j^n - \frac{1}{2} b_j^n \Delta t \right] (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + \frac{1}{2} \nu^2 (a_j^n)^2 \delta_x^2 u_j^n.$$

当 $a(x, t) \equiv a$ 时, 退化为线性常系数问题的LW格式. 由构造过程, 这个差分方程无条件有(2,2)阶局部截断误差.

例 5.7.1 设 $f(x, t)$ 已知. 建立方程

$$u_t + a(x, t)u_x = f(x, t)$$

的LW格式, 确保其具有整体二阶的局部截断误差.

证明: 根据Taylor公式,

$$[u]_j^{n+1} = [u]_j^n + \Delta t [u_t]_j^n + \frac{1}{2}(\Delta t)^2 [u_{tt}]_j^n + O((\Delta t)^3), \quad (*)$$

根据方程, 把时间导数变成空间导数为

$$\begin{aligned} [u_t]_j^n &= -[au_x]_j^n + f_j^n = -\frac{a_j^n}{2\Delta x} ([u]_{j+1}^n - [u]_{j-1}^n) + f_j^n + O((\Delta x)^2), \\ [u_{tt}]_j^n &= [(-au_x + f)_t]_j^n = -(a_t)_j^n [u_x]_j^n + a_j^n (a_x)_j^n [u_x]_j^n + (a_j^n)^2 [u_{xx}]_j^n - a_j^n (f_x)_j^n + (f_t)_j^n \\ &= (-(a_t)_j^n + a_j^n (a_x)_j^n) \frac{[u]_{j+1}^n - [u]_{j-1}^n}{2\Delta x} + (a_j^n)^2 \frac{1}{(\Delta x)^2} \delta_x^2 [u]_j^n - a_j^n (f_x)_j^n + (f_t)_j^n + O(\Delta x)^2. \end{aligned}$$

令 $b = aa_x - a_t$. 把上式代入(*)消去时间方向导数, 用数值解代替真解, 得LW格式

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \left(\frac{\nu a_j^n}{2} - \frac{\Delta t b_j^n}{4} \right) (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + \frac{\nu^2 (a_j^n)^2}{2} \delta_x^2 u_j^n + \Delta t f_j^n - (\Delta t)^2 [a_j^n (f_x)_j^n + (f_t)_j^n]$$

根据构造过程, 这个格式的相容阶是(2,2). □

5.7.2 稳定性分析方法

前面章节介绍的CFL方法、冻结系数法都可以给出模糊的稳定性结论, 而离散最大模原理可以建立最大模稳定的充分条件, 能量方法可以给出 L^2 模稳定的充分条件, Kreiss定理可以给出 L^2 模稳定的必要条件.

例 5.7.2 迎风格式、Lax格式、LW格式的CFL条件.

答: 单步时间推进中, 三个格式数值依赖区域至多在两侧展开一个网格点, CFL条件是

$$|a_j^n \Delta t| \leq \Delta x, \forall j \forall n \Rightarrow \max_{\forall x \forall t} |a(x, t)| \nu \leq 1.$$

当 $a(x, t) \equiv a$ 时就是常系数问题的CFL条件.

例 5.7.3 用冻结系数法给出迎风格式、Lax格式的稳定性条件.

答: 把 a_j^n 局部冻结为常数, 由前一章的结果即可知道相应格式的稳定性条件. 再让局部冻结遍历所有网格点, 即可得所有位置上的格式的稳定性结论的交集为它们的稳定性结论. (恰好为CFL条件).

注: CFL条件可以保证迎风格式与Lax格式满足离散最大模原理, 具有相应最大模稳定性. 用能量方法可以证明: 如果 $a(x, t)$ 足够光滑, 则CFL条件也可以保证 L^2 模稳定性. (注: 不可以用Fourier方法)

例 5.7.4 用冻结系数法给出LW格式的 L^2 模稳定性条件.

把 a_j^n, b_j^n 局部冻结为常数 a, b , 则LW格式可以变成常系数差分格式

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\nu}{2} \left[a - \frac{1}{2} b \Delta t \right] (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + \frac{1}{2} \nu^2 a^2 \delta_x^2 u_j^n.$$

它的增长因子是

$$\lambda(k) = \tilde{\lambda}(k) + \frac{i \nu b \Delta t}{2} \sin \xi, \xi = k \Delta x$$

其中,

$$\tilde{\lambda}(k) = 1 - i \nu a \sin \xi - 2 \nu^2 a^2 \sin^2 \frac{\xi}{2}$$

是常系数LW格式的增长因子, 当 $|\nu a| \leq 1$ 时, $|\tilde{\lambda}(k)| \leq 1$. 所以上述系数冻结后的变系数LW格式满足von Neumann条件:

$$|\lambda(k)| \leq 1 + \frac{|b|}{2|a|} \Delta t, \forall k.$$

所以相应 L^2 模稳定性结论是

$$\|u^n\|_2 \leq e^{\frac{|b|T}{2|a|}} \|u^0\|_2, \forall n : n \Delta t \leq T.$$

注: 当 $|b(x, t)| = 0$ 时, L^2 模稳定性结论与常系数LW格式一样. 但是如果 $|b| \neq 0$ 时, 可能会很大, 这样的稳定性结论会很差, 尤其是当 $a(t)$ 不够光滑而且含有零点的时候, 数值格式可能是不稳定的.

冻结系数法无法判别线性不稳定现象, 即对于线性常系数问题稳定的某些格式, 有可能对于线性变系数问题出现违背离散最大模原理(数值共振)的现象, 使得部分简谐波出现无法控制的增长.

例 5.7.5 设对流方程的流速与时间无关, 即 $u_t + a(x)u_x = 0$. 若在四个相邻的空间网格点 $x_0 < x_1 < x_2 < x_3$ 上, $a_j = a(x_j)$ 满足

$$a_0 = 0, a_1 > 0 > a_2, a_3 = 0,$$

相应的蛙跳格式

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} - \nu a_j [u_{j+1}^n - u_{j-1}^n]$$

局部构成一个封闭的离散系统:

$$\begin{pmatrix} u_1^{n+1} \\ u_2^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1^{n-1} \\ u_2^{n-1} \end{pmatrix} + \nu \begin{pmatrix} 0 & a_1 \\ -a_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^n \\ u_2^n \end{pmatrix}. \quad (*)$$

由于 $a_1 a_2 < 0$, 则右端二阶矩阵有互异的实特征值 $\pm \sqrt{|a_1 a_2|}$, 特征向量满足

$$\begin{pmatrix} 0 & a_1 \\ -a_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Theta_1^\pm \\ \Theta_2^\pm \end{pmatrix} = \pm \sqrt{|a_1 a_2|} \begin{pmatrix} \Theta_1^\pm \\ \Theta_2^\pm \end{pmatrix}$$

用分离变量法可以验证下式满足前面的差分格式(*).

$$\begin{pmatrix} u_1^n \\ u_2^n \end{pmatrix} = \left(\frac{\nu}{2} \sqrt{|a_1 a_2|} + \sqrt{\frac{1}{4} \nu^2 |a_1 a_2| + 1} \right)^n \begin{pmatrix} \Theta_1^+ \\ \Theta_2^+ \end{pmatrix} = O\left(e^{\nu \sqrt{|a_1 a_2|/2}}\right) \begin{pmatrix} \Theta_1^+ \\ \Theta_2^+ \end{pmatrix}$$

如果 $a(x)$ 局部连续可导, 且 $a'(x)$ 局部有界, 则

$$\sqrt{|a_1 a_2|} = O(\Delta x) = O(\Delta t),$$

从而指数增长方式可控, 上面的数值解保持有界, 即

$$\|u\|_{2,\Delta x} \leq C e^{\nu \sqrt{|a_1 a_2|} \Delta t/2} \|\Theta\|_{2,\Delta x} \leq C e^{\nu T/2} \|\Theta\|_{2,\Delta x}.$$

如果 $a(x)$ 局部变化剧烈, 例如 $a(x) = x^{1/3} \sin \frac{1}{x^2}$ 在原点附近的导数无界, 则

$$\sqrt{|a_1 a_2|} = O((\Delta x)^{1/3}) = O((\Delta t)^{1/3}).$$

此时数值解趋于无穷, 出现数值不稳定现象.

注: 如果 $a(x)$ 的符号保持不变, 则蛙跳格式不会产生线性不稳定现象. 通常数值耗散机制可以压制线性变系数造成的负面影响, 有耗散格式通常具有相对良好的稳定性表现.

§ 5.8 一阶双曲型方程组

设 $\mathbf{u}(x, t) = (u_1, u_2, \dots, u_m)^T$ 是 m 维向量值函数, 考虑线性常系数一阶偏微分方程组

$$\mathbf{u}_t + \mathbf{A} \mathbf{u}_x = 0,$$

其中 $\mathbf{A} \in M_n(\mathbb{R})$. 若 \mathbf{A} 的特征值 $\{d_l\}_{l=1}^m$ 都是实数, 且 (右) 特征向量 $\{\mathbf{r}_l\}_{l=1}^m$ 线性无关 (从而可对角化), 称上述方程组是 **(强) 双曲型**的. (暂时不管矩阵 \mathbf{A} 的对称性, 当然如果 \mathbf{A} 对称, 则特征值都是实数.)

上述一阶双曲型方程组的矩阵 \mathbf{A} 有特征分解

$$\mathbf{A} = \mathbf{R} \mathbf{D} \mathbf{R}^{-1},$$

其中 $\mathbf{D} = \text{diag}(d_1, \dots, d_m)$, $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_m)$ 是相似变换矩阵. 令

$$\mathbf{D}^\oplus = \text{diag}\{\max(d_l, 0)\}_{l=1}^m, \mathbf{D}^\ominus = \text{diag}\{\min(d_l, 0)\}_{l=1}^m,$$

并定义 \mathbf{A} 的正(负)部分分别为

$$\mathbf{A}^{\oplus} = \mathbf{R}\mathbf{D}^{\oplus}\mathbf{R}^{-1}, \mathbf{A}^{\ominus} = \mathbf{R}\mathbf{D}^{\ominus}\mathbf{R}^{-1}.$$

以及 \mathbf{A} 的绝对值为

$$|\mathbf{A}| = \mathbf{A}^{\oplus} - \mathbf{A}^{\ominus} = \mathbf{R} \cdot |\mathbf{D}| \cdot \mathbf{R}^{-1}.$$

注: \mathbf{R} 的列矩阵与 \mathbf{R}^{-1} 的行矩阵分别是右特征向量与左特征向量.

接下来定义这个方程组的差分格式. 时空网格定义如前.

例 5.8.1 构造一阶偏微分方程组的迎风格式.

答: 由特征分解, 记 $\mathbf{v} = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{u} = (v_1, v_2, \dots, v_m)^T$ (\mathbf{u} 在特征向量空间 $\text{span}\{\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_m\}$ 的投影坐标), 则可以得到完全解耦的双曲型方程组

$$\mathbf{v}_t + \mathbf{D}\mathbf{v}_x = 0,$$

对每个分量都有

$$(\mathbf{v}_l)_t + d_l(\mathbf{v}_l)_x = 0.$$

由标量方程的迎风格式, 可得相应差分方程为

$$(\mathbf{v}_l)_{j+1}^{n+1} = (\mathbf{v}_l)_j^n - \nu \max(d_l, 0)[(\mathbf{v}_l)_j^n - (\mathbf{v}_l)_{j-1}^n] - \nu \min(d_l, 0)[(\mathbf{v}_l)_{j+1}^n - (\mathbf{v}_l)_j^n], l = 1 : m. \quad (1)$$

把它们整合起来就得到

$$\mathbf{v}_j^{n+1} = \mathbf{v}_j^n - \nu \mathbf{D}^{\oplus}[\mathbf{v}_j^n - \mathbf{v}_{j-1}^n] - \nu \mathbf{D}^{\ominus}[\mathbf{v}_{j+1}^n - \mathbf{v}_j^n]. \quad (2)$$

再把 $\mathbf{u} = \mathbf{R}\mathbf{v}$ 代入可得

$$\mathbf{u}_j^{n+1} = \mathbf{u}_j^n - \nu \mathbf{A}^{\oplus}[\mathbf{u}_j^n - \mathbf{u}_{j-1}^n] - \nu \mathbf{A}^{\ominus}[\mathbf{u}_{j+1}^n - \mathbf{u}_j^n]. \quad (3)$$

利用特征分解也可以得到LW格式

$$\mathbf{u}_j^{n+1} = \mathbf{u}_j^n - \frac{1}{2}\nu\mathbb{A}\Delta_{0,x}\mathbf{u}_j^n + \frac{1}{2}\nu^2\mathbb{A}^2\delta_x^2\mathbf{u}_j^n.$$

例 5.8.2 上述迎风格式(3)的 L^2 模稳定性?

答: 由Fourier方法, 或者标量迎风格式的 L^2 模稳定性结论, 当且仅当 $|d_l|\Delta t \leq \Delta x$ 时, 标量格式(1)具有 L^2 模稳定性, 即

$$\|\mathbf{v}_l^n\|_2 \leq \|\mathbf{v}_l^0\|_2, \forall n, l = 1 : m.$$

由于(2)完全解耦, 所以可以断言: 当且仅当

$$\rho(\mathbf{A})\Delta t \leq \Delta x$$

时, 差分格式(2)具有 L^2 模稳定性结论

$$\|\mathbf{v}^n\|_2 \leq \|\mathbf{v}^0\|_2 = \left(\sum_{l=1}^n \|\mathbf{v}_l^0\|_2^2 \right)^{1/2}, \forall n.$$

代入 $\mathbf{v} = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{u}$, 可得

$$\|\mathbf{u}^n\|_2 \leq \|\mathbf{R}\|_2 \|\mathbf{R}^{-1}\mathbf{u}^n\|_2 = \|\mathbf{R}\|_2 \|\mathbf{v}^n\|_2 \leq \|\mathbf{R}\|_2 \|\mathbf{v}^0\|_2 \leq \dots \leq \|\mathbf{R}\|_2 \|\mathbf{R}^{-1}\|_2 \|\mathbf{v}^0\|_2.$$

所以存在常数 $C = \kappa(\mathbf{R}) = \|\mathbf{R}\|_2 \|\mathbf{R}^{-1}\|_2$, 使得

$$\|\mathbf{u}^n\|_2 \leq C \|\mathbf{u}^0\|_2.$$

所以当且仅当 $\rho(\mathbf{A})\Delta t \leq \Delta x$ 时,迎风格式(3)是 L^2 模稳定的.

注: 对于线性常系数问题,特征分解只需执行一次;对于线性变系数问题,特征分解需要在每个网格点执行,计算量很大,所以无须执行特征分解的数值格式更受欢迎,例如Lax格式

$$\mathbf{u}_j^{n+1} = \frac{1}{2}(\mathbf{u}_{j-1}^n + \mathbf{u}_{j+1}^n) - \frac{1}{2}\nu\mathbf{A}(\mathbf{u}_{j+1}^n - \mathbf{u}_{j-1}^n).$$

与LW格式. 同样可以证明, Lax格式和LW格式的 L^2 模稳定性条件都是 $\rho(\mathbf{A})\Delta t \leq \Delta x$,但是Lax格式的数值耗散过多, LW格式也有它的不足(数值振荡等等).

注: 矩阵的特征分解隐含着通量分裂技术的基本思想, 即

$$\mathbf{A}\mathbf{u} := \mathbf{f}(\mathbf{u}) = \mathbf{f}^\oplus(\mathbf{u}) + \mathbf{f}^\ominus(\mathbf{u}),$$

这里取 $\mathbf{f}^\oplus(\mathbf{u}) = \mathbf{A}^\oplus\mathbf{u}$, $\mathbf{f}^\ominus(\mathbf{u}) = \mathbf{A}^\ominus\mathbf{u}$. 这两个通量函数有明确的上游方向, 所以迎风格的构造是自然的.

例 5.8.3 如果取 $\mathbf{f}^\oplus = \mathbf{A}^\oplus + \gamma\mathbf{I}$, $\mathbf{f}^\ominus = \mathbf{A}^\ominus - \gamma\mathbf{I}$, $\gamma > 0$, 这也是一种通量分裂, γ 的作用如何?

答: 相应的迎风格式变成

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_j^{n+1} &= \mathbf{u}_j^n - \nu(\mathbb{B}^\oplus - \gamma\mathbb{I})[\mathbf{u}_j^n - \mathbf{u}_{j-1}^n] - \nu(\mathbb{B}^\oplus + \gamma\mathbb{I})[\mathbf{u}_{j+1}^n - \mathbf{u}_j^n] \\ &= \mathbf{u}_j^n - \nu\mathbb{B}^\oplus[\mathbf{u}_j^n - \mathbf{u}_{j-1}^n] - \nu\mathbb{B}^\oplus[\mathbf{u}_{j+1}^n - \mathbf{u}_j^n] - \gamma\nu\delta_x^2\mathbf{u}_j^n,\end{aligned}$$

其中 $\delta_x^2\mathbf{u}_j^n$ 代表对向量网格函数 \mathbf{u} 的各分量作二阶中心差商.

γ 的作用是作了黏性修正, 保证了格式有更强的稳定性. 但是, 矩阵 $\mathbb{B}^\oplus, \mathbb{B}^\ominus$ 的特征值的模比 $\mathbf{A}^\oplus, \mathbf{A}^\ominus$ 大, 而CFL条件为 $\rho(\mathbb{B})\nu \leq 1$, 则网比 ν 需要取得更小才能保证有 L^2 模稳定性. \square

§ 5.9 波动方程

考虑

$$\begin{cases} u_{tt} = a^2 u_{xx}, x \in \mathbb{R}, t > 0, \\ u|_{t=0} = f(x), \\ u_t|_{t=0} = g(x), \end{cases}$$

其中 $a > 0$. 真解可以用d'Alembert公式表示:

$$u(x, t) = \frac{1}{2}[f(x - at) + f(x + at)] + \frac{1}{2a} \int_{x-at}^{x+at} g(s) ds.$$

这样, 区间 $[x - at, x + at]$ 是点 (x, t) 在初始时刻的真实依赖区域. 与一阶的对流方程相比, 波动方程真解的波形有双向传播的特点.

5.9.1 直接离散方式

时空网格定义如前, 用二阶中心差商离散波动方程的两个导数得到经典的中心差商格式:

$$\delta_t^2 u_j^n = \nu^2 a^2 \delta_x^2 u_j^n.$$

它无条件具有(2,2)阶局部截断误差. 这是个三层格式, 数值启动需要两个初值, 比如

$$u_j^0 = f_j, u_j^1 = f_j + \frac{1}{2}\nu^2 a^2 \delta_x^2 f_j + \Delta t g_j.$$

其中 u_j^1 的得到方法是: 用中心差商近似 u_t 得到

$$u_j^1 - u_j^{-1} = 2\Delta t g_j,$$

然后又设波动方程在 $t = 0$ 处成立:

$$\delta_t^2 u_j^0 = \nu^2 a^2 \delta_x^2 u_j^0.$$

消去虚拟点值 u_j^{-1} 即可.

例 5.9.1 讨论中心差商格式的 L^2 模稳定性条件.

答: 设 $p \in \mathbb{N}^*$, $T > 0$ 是终止时刻. 回顾以前的内容, $p + 1$ 层格式的 L^2 模稳定性概念为:

存在与初值和时间层数无关(但可能与 T 有关)的界定常数 $C > 0$, 使得

$$\|u^n\|_2 \leq C \sum_{m=0}^{p-1} \|u^m\|_2, \forall n : n\Delta t \leq T.$$

如果基于这个定义, 那么用Fourier方法可以验证中心差商格式是无条件线性不稳定的. 但是数值实验表明当CFL条件 $\nu a \leq 1$ 时, 中心差商格式是收敛到问题的真解的, 由Lax-Richtmyer等价定理, 它应该是稳定的.

所以稳定性概念需要修正, 例如: $u(x, t) = t$ 满足波动方程 $u_{tt} = a^2 u_{xx}$, 它的 L^2 模有线性增长的状态, 因此数值解的离散 L^2 模也应该允许出现类似状态, 即 $\|u^n\|_2 = O(n)$. 所以我们修正稳定性概念如下:

对于带有二阶时间导数的发展型偏微分方程

$$u_{tt} = P(x, u_x, u_{xx}, \dots),$$

$p + 1$ 层格式的稳定性概念可以定义如下: 存在同初值和时间层数均无关(可能与 T 有关)的界定常数 $C > 0$, 使得

$$\|u^n\|_2 \leq C(1 + n) \sum_{m=0}^{p-1} \|u^m\|_2, \forall n : n\Delta t \leq T.$$

根据这个新定义, 用Fourier方法可以证明中心差商格式具有 L^2 模稳定性的充要条件是 $\nu a \leq 1$, 即格式的CFL条件.

对于波动方程的初边值问题, 三类边界条件都是常见的定解条件, 相应边界条件离散技术与前面提到的类似.

5.9.2 间接离散方式

定义 $v = u_t$, $w = -au_x$, 则二阶波动方程可以变成一阶双曲方程组

$$\mathbf{u}_t + \begin{pmatrix} 0 & a \\ a & 0 \end{pmatrix} \mathbf{u}_x = 0, \quad (*)$$

其中 $\mathbf{u} = (v, w)^T$. 相应的迎风格式、Lax格式与LW格式分别为

$$\mathbf{u}_j^{n+1} = \mathbf{u}_j^n - \nu \mathbb{A}^\oplus [\mathbf{u}_j^n - \mathbf{u}_{j-1}^n] - \nu \mathbb{A}^\ominus [\mathbf{u}_{j+1}^n - \mathbf{u}_j^n],$$

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_j^{n+1} &= \frac{1}{2}(\mathbf{u}_{j-1}^n + \mathbf{u}_{j+1}^n) - \frac{1}{2}\nu\mathbb{A}\Delta_{0,x}\mathbf{u}_j^n, \\ \mathbf{u}_j^{n+1} &= \mathbf{u}_j^n - \frac{1}{2}\nu\mathbb{A}\Delta_{0,x}\mathbf{u}_j^n + \frac{1}{2}\nu^2\mathbb{A}^2\delta_x^2\mathbf{u}_j^n.\end{aligned}$$

但是它们是耗散格式, 系统的总能量

$$\mathcal{E}^n = \|v^n\|_2^2 + \|w^n\|_2^2$$

是单调递减的, 无法数值保持波动方程的能量守恒性质.

下面给出三个无耗散格式:

1. 非交错网格盒子格式

把两个网格函数定义在相同的时空网格上, 用盒子格式离散(*)的两个方程, 得到

$$\begin{aligned}\Pi_x v_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} - \Pi_x v_{j+\frac{1}{2}}^n + \nu a(\Pi_t w_{j+1}^{n+\frac{1}{2}} - \Pi_t w_j^{n+\frac{1}{2}}) &= 0, \\ \Pi_x w_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} - \Pi_x w_{j+\frac{1}{2}}^n + \nu a(\Pi_t v_{j+1}^{n+\frac{1}{2}} - \Pi_t v_j^{n+\frac{1}{2}}) &= 0,\end{aligned}$$

其中 Π_x, Π_t 是沿着不同方向的两个平均算子. 初值条件是 $w_j^0 = -af_x(x_j), v_j^0 = g(x_j)$.

由Fourier方法与Kreiss定理, 非交错网格盒子格式是无条件 L^2 模稳定的.

2. 非交错网格蛙跳格式

把两个网格函数定义在相同的时空网格上, 用蛙跳格式离散(*)的两个方程, 得到

$$\begin{aligned}v_j^{n+1} - v_j^{n-1} + \nu a(w_{j+1}^n - w_{j-1}^n) &= 0, \\ w_j^{n+1} - w_j^{n-1} + \nu a(v_{j+1}^n - v_{j-1}^n) &= 0.\end{aligned}$$

它是三层格式, 数值启动需要两个初值, v^0, w^0 可以直接赋值, 而 v^1, w^1 需要用其他格式给出.

当且仅当 $|\nu a| \leq 1$ 时, 非交错网格蛙跳格式是 L^2 模稳定的.

例 5.9.2 分析非交错网格蛙跳格式的 L^2 模稳定性.

证明: 令 $p_j^n = v_j^{n-1}, q_j^n = w_j^{n-1}$. 则

$$\begin{cases} v_j^{n+1} - p_j^n + \nu a(w_{j+1}^n - w_{j-1}^n) = 0, \\ w_j^{n+1} - q_j^n + \nu a(v_{j+1}^n - v_{j-1}^n) = 0, \\ p_j^{n+1} = v_j^n, \\ q_j^{n+1} = w_j^n. \end{cases}$$

记向量网格函数 $\mathbf{u} = (v, w, p, q)^T$, 则

$$\mathbf{u}_j^{n+1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \mathbf{u}_j^n - \begin{pmatrix} 0 & \nu a & 0 & 0 \\ \nu a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \mathbf{u}_{j+1}^n - \begin{pmatrix} 0 & -\nu a & 0 & 0 \\ -\nu a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \mathbf{u}_{j-1}^n$$

代入模态解 $\mathbf{u}_j^n = \hat{\mathbf{u}}^n e^{ikj\Delta x}$, 可得

$$\hat{\mathbf{u}}^{n+1} = \mathbb{G}\hat{\mathbf{u}}^n,$$

其中

$$\mathbb{G} = \begin{pmatrix} 0 & -2i\nu a \sin \xi & 1 & 0 \\ -2i\nu a \sin \xi & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

根据分块矩阵的性质, 特征方程为 $\det(\lambda I - \mathbb{G}) = 0$, 即

$$(\lambda^2 - 1)^2 + 4\nu^2 a^2 \lambda^2 \sin^2 \xi = 0.$$

特征值满足

$$\lambda^2 = 1 \pm 2\nu a \lambda \sin \xi i.$$

解得四个特征根为

$$\lambda_{1,2} = \pm \sqrt{1 - \nu^2 a^2 \sin^2 \xi} + i\nu a \sin \xi, \lambda_{3,4} = \pm \sqrt{1 - \nu^2 a^2 \sin^2 \xi} - i\nu a \sin \xi.$$

若 $1 - \nu^2 a^2 \sin^2 \xi \geq 0, \forall \xi$, 即 $|\nu a| \leq 1$, 此时四个特征根的模都为1, 满足von Neumann条件. 由于 \mathbb{G} 是对称阵, 则 $\mathbb{G}^H \mathbb{G} = \mathbb{G} \mathbb{G}^H$. 根据Kreiss定理, von Neumann条件也是充分条件.

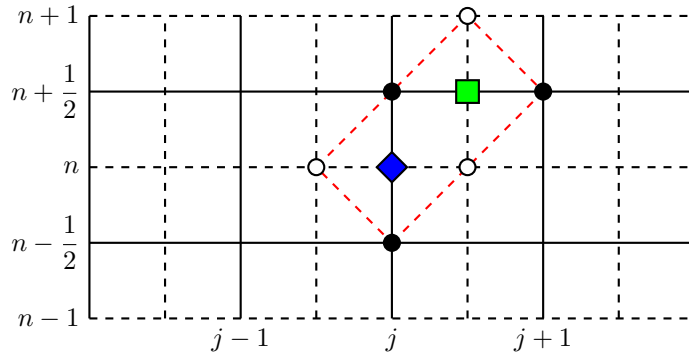
若 $|\nu a| > 1$, 取 $\xi = \frac{\pi}{2}$, 则四个特征根的模为 $(\sqrt{1 - \nu^2 a^2} \pm \nu)^2 = 1 \pm 2\sqrt{1 - \nu^2 a^2} \nu a$. 按模较大的特征根大于1, 不满足von Neumann条件, 所以这个格式不是 L^2 模稳定的.

综上, 当且仅当 $|\nu a| \leq 1$ 时, 非交错网格蛙跳格式是 L^2 模稳定的. \square

3. 交错网格蛙跳格式

如下图, 实线交叉点构成一个时空网格, 虚线交叉点也构成时空网格, 两个时空网格彼此交错, 形成一套交错网格. 分别把两套(实线、虚线)时空网格定义为

$$T_{\Delta x, \Delta t} = \{(x_j, t^{n+\frac{1}{2}})\}_{\forall j \forall n}, \tilde{T}_{\Delta x, \Delta t} = \{(x_{j+\frac{1}{2}}, t^n)\}_{\forall j \forall n}.$$



在上面的蓝色点与绿色点用蛙跳格式来分别离散(*)的第一、第二个方程, 可得

$$\begin{aligned} v_j^{n+\frac{1}{2}} - v_j^{n-\frac{1}{2}} + \nu a (w_{j+\frac{1}{2}}^n - w_{j-\frac{1}{2}}^n) &= 0 \\ w_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} - w_{j+\frac{1}{2}}^n + \nu a (w_{j+1}^{n+\frac{1}{2}} - v_j^{n+\frac{1}{2}}) &= 0 \end{aligned}$$

这样在实网格点对应的都是 v , 在虚网格点对应的都是 w .

它是个双层格式, 初值条件为

$$w_{j+\frac{1}{2}}^0 = -a f_x(x_{j+\frac{1}{2}}), v_j^{\frac{1}{2}} = g(x_j) + \frac{1}{2} \Delta t a^2 f_{xx}(x_j).$$

注: 上面三个格式都无条件有(2,2)阶局部截断误差. 由于系数矩阵特殊, 无需执行特征分解过程.

例 5.9.3 当且仅当 $\nu a < 1$ 时, 交错网格蛙跳格式有 L^2 模稳定性.

证明: 离散对象是带有一阶时间导数的偏微分方程组, 所以双层格式的稳定性概念如前, 把模态解

$$v_j^{n+1/2} = \hat{v}^{n+1/2} e^{ikj\Delta x}, w_{j+\frac{1}{2}}^n = \hat{w}^n e^{ik(j+1/2)\Delta x}$$

代入格式, 可得增长矩阵为

$$\mathbf{G} = \tilde{\mathbf{G}}(\xi) = \begin{pmatrix} 1 & ic \\ ic & 1 - c^2 \end{pmatrix}$$

其中 $c = -2\nu a \sin \frac{\xi}{2}$, $\xi = k\Delta x$. 格式 L^2 模稳定的必要条件是严格的 von Neumann 条件成立, 它等价于 CFL 条件 $\nu a \leq 1$. 我们再看充分条件:

(1) 设 $\nu a < 1$. 当 $\xi \neq 2m\pi$ 时, 两个互异特征值都在单位圆周上; 当 $\xi = 2m\pi$ 时, 增长矩阵是单位矩阵, 它的导数矩阵为

$$\tilde{\mathbf{G}}'(2m\pi) = \begin{pmatrix} 0 & -i\nu a(-1)^m \\ -i\nu a(-1)^m & 0 \end{pmatrix}$$

它的谱半径小于 1. 由 Kreiss 矩阵定理, 蛙跳格式具有 L^2 模稳定性.

(2) 若 $\nu a = 1$, 考虑 $v_j^{1/2} = (-1)^j$, $w_{j+1/2}^0 = 0$, 则由归纳法可知

$$v_j^{n+1/2} = (-1)^{n+j}(1+2n), w_{j+1/2}^n = (-1)^{n+j+1}(2n)$$

所以此时蛙跳格式不稳定. □

注: 若 $\nu a \leq \delta < 1$, 也可以证明这个格式 L^2 模稳定.

§ 5.10 高维对流方程

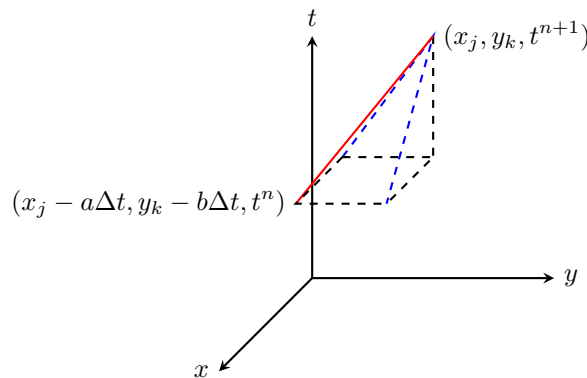
考虑二维线性常系数对流方程

$$u_t + au_x + bu_y = 0,$$

的纯初值问题或周期边值问题, 其中 $a, b > 0$. 如果设初值为 $u(x, y, 0) = f(x, y)$, 则真解为

$$u(x, y, t) = f(x - at, y - bt).$$

这样就可以确定真解的依赖区域了: (红色实线)



设 $T_{\Delta x, \Delta y, \Delta t}$ 是等距时空网格, 网比 $\nu_x = \Delta t / \Delta x$, $\nu_y = \Delta t / \Delta y$.

基于一阶空间导数的迎风离散策略, 用逐维离散技术可得二维迎风格式

$$u_{jk}^{n+1} = u_{jk}^n - \nu_x a [u_{jk}^n - u_{j-1,k}^n] - \nu_y b [u_{jk}^n - u_{j,k-1}^n].$$

它无条件有 (1,1,1) 阶局部截断误差.

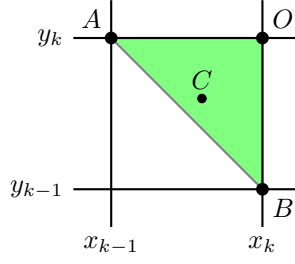
例 5.10.1 分析二维迎风格式的 CFL 条件与 L^2 模稳定性.

(a) 首先看二维迎风格式的 CFL 条件. 在一步时间推进中, u_{jk}^{n+1} 与 $u_{j,k}^n, u_{j-1,k}^n, u_{j,k-1}^n$ 有关. 所以 CFL 条件就是让点 $C(x_j - a\Delta t, y_k - b\Delta t)$ 落入三角形区域中, 即在直线 AB 的上方. $|OA| = \Delta x, |OB| = \Delta y$, 由高中知识, CFL 条

件为

$$\nu_x a + \nu_y b \leq 1.$$

(如果 a, b 符号未知, 则CFL条件就是 $\nu_x |a| + \nu_y |b| \leq 1$.)



(b) L^2 模稳定性: 把模态解 $u_{jk}^n = \lambda^n e^{i(k_1 j \Delta x + k_2 k \Delta y)}$ 代入格式, 可得

$$\lambda^{n+1} = \lambda^n [1 - \nu_x a(1 - e^{-ik_1 \Delta x}) - \nu_y b(1 - e^{-ik_2 \Delta y})].$$

所以

$$\begin{aligned} |\lambda|^2 &= (1 - \nu_x a - \nu_y b)^2 + (\nu_x a \cos k_1 \Delta x + \nu_y b \cos k_2 \Delta y)^2 \\ &\quad + 2(1 - \nu_x a - \nu_y b)(\nu_x a \cos k_1 \Delta x + \nu_y b \cos k_2 \Delta y) + (\nu_x a \sin k_1 \Delta x + \nu_y b \sin k_2 \Delta y)^2 \\ &= (1 - \nu_x a - \nu_y b)^2 + (\nu_x a)^2 + (\nu_y b)^2 + 2\nu_x \nu_y ab \cos[k_1 \Delta x - k_2 \Delta y] \\ &\quad + 2(1 - \nu_x a - \nu_y b)(\nu_x a \cos k_1 \Delta x + \nu_y b \cos k_2 \Delta y), \forall k_1 \forall k_2. \end{aligned}$$

若 $1 - \nu_x a - \nu_y b \geq 0$, 则

$$|\lambda|^2 \leq (1 - \nu_x a - \nu_y b)^2 + (\nu_x a + \nu_y b)^2 + 2(1 - \nu_x a - \nu_y b)(\nu_x a + \nu_y b) = 1.$$

若 $1 - \nu_x a - \nu_y b < 0$, 则

$$|\lambda|^2 \leq (1 - \nu_x a - \nu_y b)^2 + (\nu_x a + \nu_y b)^2 - 2(1 - \nu_x a - \nu_y b)(\nu_x a + \nu_y b) = (1 - 2\nu_x a - 2\nu_y b)^2.$$

所以

$$|\lambda|^2 \leq \max\{1, (1 - 2\nu_x a - 2\nu_y b)^2\},$$

从而迎风格式具有 L^2 模稳定性的充要条件是严格的von Neumann条件成立, 即 $\max\{1, (1 - 2\nu_x a - 2\nu_y b)^2\} \leq 1$, 即 $|\nu_x a + \nu_y b| \leq 1$. \square

注: 在这里, CFL条件也是 L^2 模稳定性的条件. 当CFL条件成立时, 迎风格式右端系数都为非负, 从而有最大模稳定性.

例 5.10.2 用时间Taylor方法构造二维对流方程的LW格式.

由Taylor公式

$$[u]_{jk}^{n+1} = [u]_{jk}^n + \Delta t [u_t]_{jk}^n + \frac{1}{2} \Delta t^2 [u_{tt}]_{jk}^n + O((\Delta t)^3).$$

其中

$$\begin{aligned} [u_t]_{jk}^n &= -a[u_x]_{jk}^n - b[u_y]_{jk}^n, \\ [u_{tt}]_{jk}^n &= a^2[u_{xx}]_{jk}^n + 2ab[u_{xy}]_{jk}^n + b^2[u_{yy}]_{jk}^n. \end{aligned}$$

用中心差商离散空间导数, 得到二维LW格式(其中 $\Delta_0 = \mathbb{E} - \mathbb{E}^{-1}$)

$$u_{jk}^{n+1} = u_{jk}^n - \frac{1}{2}(\nu_x a \Delta_{0x} u_{jk}^n + \nu_y b \Delta_{0y} u_{jk}^n) + \frac{1}{2}(\nu_x^2 a^2 \delta_x^2 u_{jk}^n + \nu_y^2 b^2 \delta_y^2 u_{jk}^n) + \frac{1}{4} \nu_x \nu_y ab \Delta_{0x} \Delta_{0y} u_{jk}^n.$$

离散模板有9个空间网格点, 由Fourier方法,

$$|\nu_x a| \leq \frac{1}{2\sqrt{2}}, |\nu_y b| \leq \frac{1}{2\sqrt{2}}$$

是二维LW格式有 L^2 模稳定性的条件. 这个时空约束条件比一维更苛刻.

注: 二维LW格式不是一维LW格式的直接推广. 如果直接用逐维离散的思路, 最终得到的差分格式没有上面的红色部分(4个角点), 但是时间方向二阶相容不成立, 而且它线性无条件 L^2 模不稳定.

注: 用算子分裂方法(LOD方法、ADI方法等)勉强改善高维双曲方程的计算效率, 详略.

5.10.1 守恒律构造方法

第6章 守恒律方程

$$\begin{aligned}
 & \left\{ \begin{array}{l} \text{方程: } u_t + F(u)_x = 0 \\ \text{特征线} \left\{ \begin{array}{l} \text{满足: } \frac{dx(t)}{dt} = F'(u(x, t), t). \\ \text{在特征线上, } u \text{ 的值为常数.} \\ \text{方程的解 } u \text{ 满足隐式方程 } u(x, t) = u_0(x - F'(u(x, t))t), \text{ 其中 } u_0 = u|_{t=0}. \\ \text{特征线相交: 产生间断点.} \\ \text{界面移动速度(间断点推进速度): } s = \frac{dx(t)}{dt}. \end{array} \right. \\ \text{守恒律方程} \left\{ \begin{array}{l} \text{弱解} \left\{ \begin{array}{l} \text{满足 } 0 = \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty (u\phi_t + F(u)\phi_x) dx dt + \int_{-\infty}^\infty u_0\phi_0 dx, \forall \phi \in C_0^1. \\ \text{激波: 间断点两边的特征线在间断点处发生碰撞.} \\ \text{弱解} \Rightarrow \text{RH跳跃条件: } (u_L - u_R) \frac{dx_C}{dt} = F(u_L) - F(u_R). \end{array} \right. \\ \text{熵条件} \left\{ \begin{array}{l} \text{目的: 从众多弱解中得到唯一的物理解.} \\ \text{Osher熵条件} \left\{ \begin{array}{l} \text{满足: } F'(u_L) \geq s \geq F'(u_R). \\ \text{Osher熵条件不等式严格成立} \Rightarrow \text{间断点为激波.} \\ \text{设 } F \text{ 凸, 则 } u_L > u_R \Leftrightarrow \text{Osher熵条件.} \end{array} \right. \\ \text{Oleinik熵条件} \left\{ \begin{array}{l} \text{满足: } \frac{F(u_L) - F(u_R)}{u_L - u} \geq s \geq \frac{F(u_R) - F(u)}{u_R - u}. \\ \text{针对非凸的情形.} \end{array} \right. \end{array} \right. \end{array} \right.
 \end{aligned}$$

接下来考虑一维标量双曲守恒律

$$u_t + F(u)_x = 0, (x, t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+.$$

的纯初值问题或周期边值问题. 其中 $F: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ 是连续可微的已知通量函数,

由于它具有很多不同的性质, 所以理论研究和数值模拟更有挑战性, 比如即使初值光滑, 有的数值格式也会得到完全错误的解. 所以以前介绍的数值格式不能简单迁移到守恒律方程, 需要谨慎筛选与完善.

§ 6.1 守恒律方程理论

考虑下面的方程:

$$u_t + \frac{\partial}{\partial x} F(u) = 0, \quad (1)$$

其中 $F'' \geq 0$, 推导守恒律的方式是对任意区间 $[x_0, x_1]$ 上对物质(substance)作积分: $\int_{x_0}^{x_1} u(x, t) dx$ 得到的.

守恒律指出物质变化率等于穿过边界的流场速度(flux) (加上区域内部出现或者被破坏的物质, 但是我们对齐次方程更感兴趣, 所以先忽略) 即

$$\frac{d}{dt} \int_{x_0}^{x_1} u(x, t) dx = [F]_{x_0}^{x_1}.$$

在这里 F 就是通量函数(flux function). 交换左边的积分与求导次序, 就可以得到

$$\int_{x_0}^{x_1} (u_t - F_x) dx = 0.$$

根据区间 $[x_0, x_1]$ 的任意性, 而且函数 $u_t - F_x$ 光滑, 就可以得到(1)式了.

6.1.1 激波的形成

重写(1)式为非守恒形式

$$u_t + F'(u)u_x = 0. \quad (2)$$

定义(1)或(2)的特征线为下面微分方程的解:

$$\frac{dx(t)}{dt} = F'(u(x(t), t)), \quad (3)$$

则在特征线上(即满足(3)的曲线 $x = x(t)$), 我们有

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}u(x(t), t) &= u_x(x(t), t) \frac{d}{dt}x(t) + u_t(x(t), t) \\ &= u_x(x(t), t)F'(u(x(t), t)) + u_t(x(t), t) \\ &= 0 \end{aligned}$$

其中 u 是微分方程(2)的解. 于是得到了

命题 6.1.1 在任意由(3)定义的特征线上, PDE(2)或(1)上的解都是常数.

注: 在线性情况下 $u_t + au_x = 0$, 方程(3)等价于

$$\frac{d}{dt}x(t) = a.$$

特征线方程为 $x(t) = at + C$. 而且双曲型方程初值问题

$$\begin{cases} u_t + au_x = 0, x \in \mathbb{R}, t > 0, \\ u|_{t=0} = u_0(x), x \in \mathbb{R}. \end{cases}$$

这个解可以表示为 $u(x, t) = u_0(x - at)$. 而对于非线性守恒律方程, 我们有类似结论:

命题 6.1.2 若守恒律方程(1)或方程(2)的初值问题的解 u 充分光滑, 初始条件 $u(x, 0) = u_0(x)$, 则 u 满足

$$u(x, t) = u_0(x - F'(u(x, t))t), x \in \mathbb{R}, t > 0.$$

证明这个结论只需要对上述解求导, 然后证明 $u_t + F'(u)u_x \equiv 0$.

注: 注意到无黏的Burgers方程

$$u_t + (u^2/2)_x = 0$$

的特征线就是下面方程的解:

$$\frac{d}{dt}x(t) = u(x(t), t),$$

注: 由于(3)中 u 是常数, 所以守恒律方程的特征线一定是直线, 即

$$x(t) = F'(u_0)t + C,$$

其中 u_0 是 u 沿着该特征线的常数. 这种情况与线性情形类似, 只不过特征线的斜率通常会不同.

例 6.1.1 区间 $[0, 1]$ 上的无黏Burgers方程, 特征线相交.

初值取 $u_0(x) = \sin 2\pi x, x \in [0, 1]$, 满足 $F(u) = \frac{1}{2}u^2, F'(u) = u$. 特征线

$$x(t) = F'(u_0)t + \text{constant} = (\sin 2\pi x_0)t + x_0$$

是相交的. 通常守恒律方程的特征线都会相交, (但不一定像下图一样相交于垂直直线).

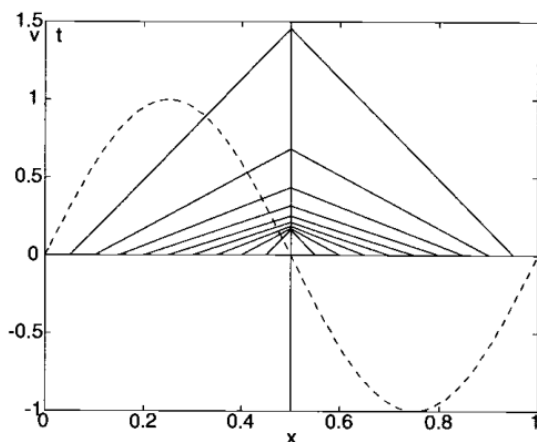


FIGURE 9.2.2. Plots of both the initial condition $v_0 = \sin 2\pi x$ (dotted curve) and the characteristic curves associated with $x = 0.05, 0.1, 0.15, \dots, 0.95$.

当两条特征线 $x = F'(u_0)t + x_0, x = F'(u_1)t + x_1$ 相交于点 (x, t) 的时候, 在这一点解既是 u_0 也是 u_1 , 即解在特征线相交处变成双值的(或多值). 随着时间发展, 在相交的时刻之后, 解会变成三个不同的值, 看起来就像一个“间断的波(breaking wave)”, 如下图. 那我们就把两条特征线第一次相交的时间 $t = T_b$ 称为间断点(breaking point).

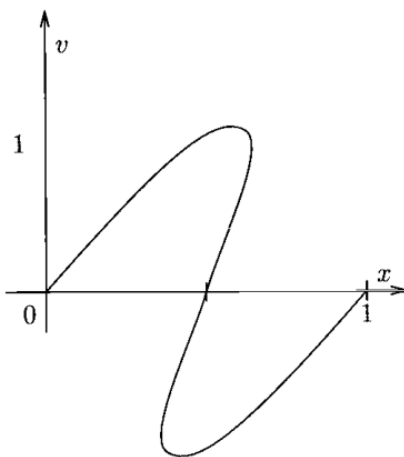


FIGURE 9.2.3. An example of what the solution is trying to become after the characteristics have crossed.

我们希望守恒律方程的解符合物理意义(不会有多解), 必须充分好地刻画一个物理现象, 否则就要建立一个新的模型方程. 带相交特征线的守恒律方程是物理系统的一个近似, 通常会忽略了一些带黏性的项, 此时解曲线会变得非常陡峭, 但是不会出现多值.

通常, 我们希望(1)的解是下面方程的解让 $\nu \rightarrow 0$ 时的极限:

$$u_t + F(u)_x = \nu u_{xx} \text{ (或者 } \nu(\beta(u)u_x)_x),$$

其中 $\beta(u) > 0$. 在间断点处, 我们会得到不连续的解, 这样, 这些解不会是(1)的古典解, 也就是说不一定处处可微.

例 6.1.2 求下面问题的所有间断点:

$$u_t + (u^2/2)_x = 0, x \in \mathbb{R}, t > 0,$$

初值 $u|_{t=0} = \sin 2\pi x, x \in \mathbb{R}$. 提示: 找特征线在点 $\frac{1}{2} \pm \delta$ 附近的表现, 取 x 使得两条特征线上的值相等, 求出 t , 然后让 $\delta \rightarrow 0$.

6.1.2 弱解

为了考虑方程(1)的不连续解, 有必要考虑(1)的弱解. 我们在这里不需要很多弱解的复杂定理, 这里只需要给个简单的介绍.

考虑守恒律方程(1)的初边值问题, $x \in \mathbb{R}, t > 0$, 初值条件

$$u|_{t=0} = u_0(x), x \in \mathbb{R}.$$

定义检验函数(test function)集合为 C_0^1 :

$$\{\phi \in C^1 : \phi \text{ 有紧支集}\}.$$

如果把(1)式乘上 $\phi \in C_0^1$ 再积分, 得到

$$\begin{aligned} 0 &= \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty (u_t + F(u)_x) \phi(x, t) dx dt \\ &= \int_0^T \int_a^b [u_t + F(u)_x] \phi(x, t) dx dt, (\phi \in C_0^1), \\ &= \int_a^b \left[(u\phi) \Big|_0^T - \int_0^T u \phi_t dt \right] dx + \int_0^T \left[(F(u)\phi) \Big|_a^b - \int_a^b F(u) \phi_x dx \right] dt \\ &= - \int_a^b u(x, 0) \phi(x, 0) dx - \int_a^b \int_0^T u \phi_t dt dx - \int_0^T \int_a^b F(u) \phi_x dx dt. \end{aligned}$$

注意 $\phi(x, T) = \phi(a, t) = \phi(b, t) = 0$. 因此可以重写上式为

$$0 = \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty (u \phi_t + F(u) \phi_x) dx dt + \int_{-\infty}^\infty u_0 \phi_0 dx. \quad (5)$$

其中 $u_0 = u(x, 0), \phi_0 = \phi(x, 0)$. 我们证明了:

命题 6.1.3 若 u 初边值问题(1)的古典解, 则对任意 $\phi \in C_0^1$, u 满足(5)式.

命题 6.1.4 若 u 关于 x, t 都连续可微, 而且对任意 $\phi \in C_0^1$ 都满足(5), 则 u 也是(1)的古典解.

由于 u 不一定是连续可微的, 所以引入如下的定义:

定义 6.1.1 若对任意 $\phi \in C_0^1$, u 满足(5), 则称 u 是初值问题(1)的弱解.

例 6.1.3 证明

$$v(x, t) = \begin{cases} 1, & x \leq t/2, \\ 0, & x > t/2, \end{cases}$$

是无粘 Burgers 方程

$$v_t + \left(\frac{1}{2} v^2 \right)_x = 0$$

的弱解, 初值条件为

$$v_0(x) = \begin{cases} 1, & x \leq 0, \\ 0, & x > 0, \end{cases}$$

证明: 按照上面对于问题(1)弱解的定义即可. \square

注: 这个问题的特征曲线是相交的, 所以我们需要考虑弱解. 一个“解”看起来显然不是古典解, 但也有可能是弱解.

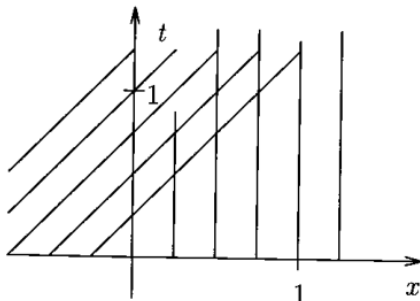


FIGURE 9.2.4. Characteristic curves

注: 解的间断的地方在曲线 $x = t/2$ 处推进, 所以间断点(discontinuity)的推进速度是 $s = \frac{dx}{dt} = \frac{1}{2}$.

注: 分段连续弱解的间断点处叫做一个**激波(shock)**, 若间断点两边的特征线在间断曲线上“碰撞”. 记

$$a_L = F'(u_L), a_R = F'(u_R),$$

其中 u_L, u_R 分别代表 u 在左边和右边的间断点处的值. 如果

$$a_L > s > a_R, \quad (6)$$

则间断点会成为一个激波, 其中 s 是间断点的推进速度. 在前面的例子中, $a_L = 1, a_R = 0, s = \frac{1}{2}$, 上述不等式(6)满足.

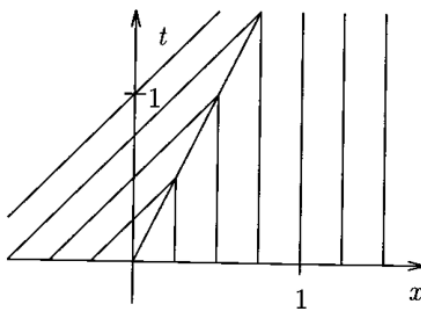


FIGURE 9.2.5. Characteristic curves associated with the solution given in Example 9.2.1

例 6.1.4 证明

$$v(x, t) = \begin{cases} 0, & x \leq t/2, \\ 1, & x > t/2, \end{cases}$$

是无粘 *Burgers* 方程

$$v_t + \left(\frac{1}{2} v^2 \right)_x = 0$$

的弱解, 初值条件为

$$v_0(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0, \\ 1, & x > 0, \end{cases}$$

注: 在这个例子中, $s = \frac{1}{2}$, $a_L = 0$, $a_R = 1$, 不满足不等式(6), 所以这个解的间断点不是激波.

例 6.1.5 证明

$$v(x, t) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ x/t, & 0 \leq x \leq t, \\ 1, & x > t, \end{cases}$$

是无粘 *Burgers* 方程

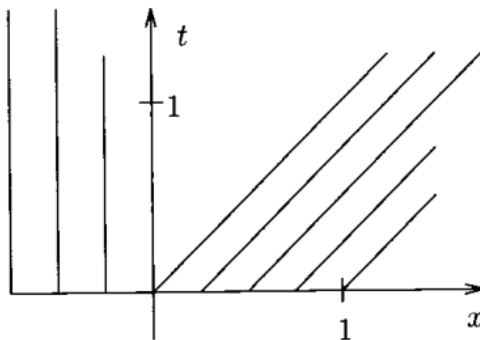
$$v_t + \left(\frac{1}{2}v^2\right)_x = 0$$

的弱解, 初值条件为

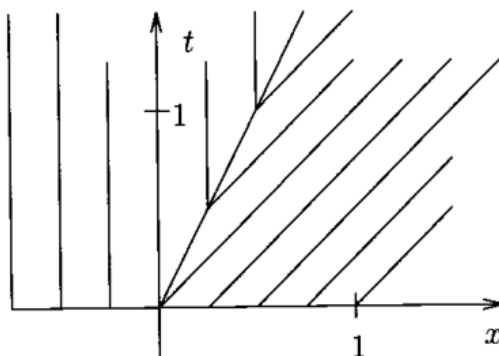
$$v_0(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0, \\ 1, & x > 0, \end{cases}$$

注: 从两个例子可以看出, 初值问题的弱解不是唯一的.

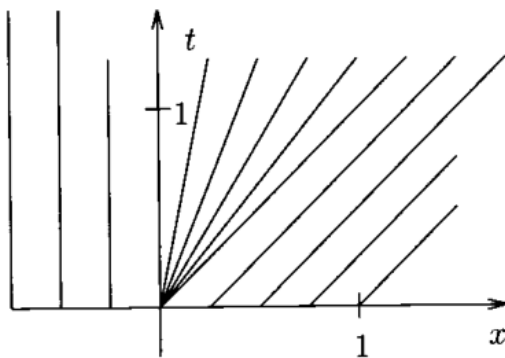
注: 可以发现由于 $x < 0$ 时的特征线比 $x > 0$ 的特征线的斜率要大, 所以有一部分区域内是没有特征线穿过的:



例6.1.4的解指出, 用曲线 $t = 2x$ 发出的特征线来填充那个区域(如图9.2.7). 由于曲线 $t = 2x$ 两侧的特征线会从间断点发出, 而不是会聚于间断点, 所以例6.1.4的解不是激波.



例6.1.5指出, 可以用一“扇”特征线来填充空白区域(如图9.2.8). 因此, 我们可以用至少两种不同的方式来填充丢失的特征线, 对应于不同弱解. 后面我们会指出哪一种是我们想要的弱解.



注: 上述三个例子的解都可以写成 $\psi(x/t)$ (自相似结构), 比如例6.1.5的解可以写成

$$u(x, t) = \psi(x/t), \psi(\xi) = \begin{cases} 1, & \xi < 0, \\ \xi, & 0 \leq \xi \leq 1, \\ 0, & \xi > 1. \end{cases}$$

注: 例6.1.5的解是连续的, 当 $t > 0$ 时, 除了 $x = 0, x = t$ 以外解都是连续可微的. 在点 $(x, t) = (0, 0)$ 以及 $x = 0, x = t$ 的表现使得 u 不是一个古典解.

例6.1.5的解有局部的**稀疏波**结构, 通过自相似结构, 可以把扇形区域外侧的两个状态连续连接起来, 除了起始点, 后续时刻的稀疏波都是局部连续的, 但是位于扇形区域边界的空间导数是间断的.

6.1.3 RH条件

为了方便, 我们设守恒律方程纯初值问题

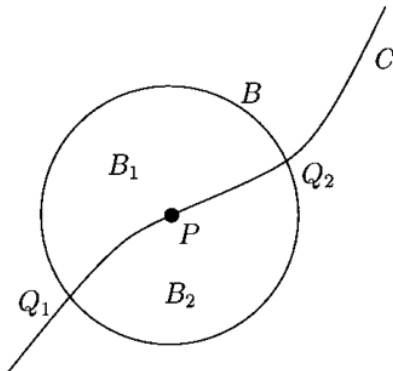
$$\begin{cases} u_t + [F(u)]_x = 0, \\ u|_{t=0} = u_0(x), x \in \mathbb{R} \end{cases}$$

的解是光滑的(除了一条或几条曲线上不连续). 而且用Riemann积分来代替Lebesgue积分, 这样就有下面的结果:

命题 6.1.5 设 C 是 $x-t$ 空间 $(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^+)$ 内的光滑曲线, $x_C = x_C(t)$, u 是守恒律方程纯初值问题的弱解并有跳跃间断点. 设 $P = (x_0, t_0), t_0 > 0$, 是 C 上任意点, $s = \frac{dx_C}{dt}(t_0)$, 并设 u_L, u_R 分别是 u 在 P 处的左极限和右极限, 则

$$(u_L - u_R) \frac{dx_C}{dt} = F(u_L) - F(u_R).$$

证明: 设 B 是以 P 为中心的小球, 不包含点 $(x_C(0), 0)$. 并设 B_1, B_2 分别表示球 B 在曲线 C 的两侧, 如下图:



由于 u 是弱解, 则对任意 $\phi \in C_0^1$, u 满足(5)式. 取函数 ϕ 是 B 中的一个支撑, 则

$$\begin{aligned} 0 &= \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty (u\phi_t + F(u)\phi_x) dx dt \\ &= \int_{B_1} (u\phi_t + F(u)\phi_x) dx dt + \int_{B_2} (u\phi_t + F(u)\phi_x) dx dt \end{aligned}$$

由于 u 在 B_1, B_2 内都是光滑的, 则根据 $u_t + F(u)_x = 0$ 在两个区域内都满足可知

$$0 = \int_{B_1} [(u\phi)_t + (F(u)\phi)_x] dx dt + \int_{B_2} [(u\phi)_t + (F(u)\phi)_x] dx dt.$$

由Green公式,

$$0 = \int_{\partial B_1} \phi[-u dx + F(u) dt] + \int_{\partial B_2} \phi[-u dx + F(u) dt].$$

如果定义

$$\begin{aligned} u_L(t) &= \lim_{(x,t) \rightarrow C, (x,t) \in B_1} u(x, t), \\ u_R(t) &= \lim_{(x,t) \rightarrow C, (x,t) \in B_2} u(x, t), \end{aligned}$$

并根据 $\phi|_{\partial B} = 0$, 可知

$$0 = \int_{Q_1}^{Q_2} \phi[-u_L dx + F(u_L) dt] - \int_{Q_1}^{Q_2} \phi[-u_R dx + F(u_R) dt].$$

这里第二项有负号是因为曲线 B_1, B_2 反向. 利用 $dx = x'_C(t)dt$, 可得

$$0 = \int_{Q_1}^{Q_2} \phi \left[-(u_L - u_R) \frac{dx_C}{dt} + (F(u_L) - F(u_R)) \right] dt.$$

利用 $\phi \in C_0^1$ 的任意性, 即可得欲证结论. □

注: 把

$$s = \frac{dx_C}{dt}$$

称作界面移动速度(间断点推进速度, speed of propagation of the discontinuity). 如果定义 $[\cdot]$ 为 C 的跳跃, 比如 $[f] = f_L - f_R$, 则可以把上述定理的结论改写为

$$\boxed{s \cdot [u] = [F(u)]}.$$

把它叫做**Rankine-Hugoniot(RH)跳跃条件**. 这个跳跃条件是说, 任意弱解的跳跃间断点都应该满足RH跳跃条件. 在物理上不可接受的弱解可能也会满足跳跃条件!

用这个RH跳跃条件可以得到Burgers方程的界面移动速度的结论, 见J.W.Thomas书.

6.1.4 熵条件

我们需要决定哪些弱解是我们所需要的, 不过我们并不是想解释或者选择“正确的”弱解.

一种方式是选择第一小节里面的黏性问题然后取极限(让黏性部分消失), 把这样的解称作是**黏性消失解(vanishing viscosity solutions)**.

命题 6.1.6 如果黏性消失解存在, 则它也是个弱解.

证明: 首先考虑黏性问题

$$u_t^\varepsilon + F(u^\varepsilon)_x = \varepsilon u_{xx}^\varepsilon,$$

如果用它乘一个 C_0^2 的检验函数 (ϕ, ϕ_x 都具有紧支集), 类似前面的计算, 我们有

$$-\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty (u^\varepsilon \phi_t + F(u^\varepsilon) \phi_x) dx dt - \int_{-\infty}^\infty u_0^\varepsilon \phi_0 dx = \varepsilon \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty u^\varepsilon \phi_{xx} dx dt.$$

令 $\varepsilon \rightarrow 0$, 则 $u^\varepsilon \rightarrow u, F(u^\varepsilon) \rightarrow F(u)$, 解决了把 C_0^2 函数转化为 C_0^1 检验函数的问题以后, 就可以知道黏性消失解确实是弱解. \square

另一种方法是对物理模型问题选取一个尽可能模拟它的解. 对于一个稳定的物理问题, 我们需要找一个唯一的解, 通常如果我们的数学模型没有唯一解, 我们需要加入一些物理使得解唯一. 就比如例6.1.4是不可接受的, 因为穿过间断点会出现熵减. 而例6.1.5不会有熵减.

首先引入两个通常用到的熵条件. 第一个熵条件我们不清楚能否模拟物理的熵变化情况, 但是第二个熵条件提出了一种方式, 找到一个长得像系统内部的熵的新变量, 并用它来模拟气体动力学里面的熵条件.

定义 6.1.2 (Osher熵条件) 称方程(5)的解 $u = u(x, t)$ 满足熵条件 I (Osher熵条件), 若界面移动速度 s 满足

$$F'(u_L) \geq s \geq F'(u_R).$$

其中 u_L, u_R 分别是间断点左侧与右侧的极限.

注: 例6.1.4不满足Osher熵条件, 例6.1.5满足Osher熵条件.

注: 通常, 对任意凸的通量函数 F , 如果 $u_L > u_R$ 且满足RH条件, 则Osher熵条件也满足. 但是如果 $u_L < u_R$ 且满足RH条件, 则Osher熵条件不满足. 例如: Burgers方程.

下面的命题指出Osher熵条件可以推出守恒律方程解的存在唯一性.

命题 6.1.7 设 F 是凸的, 而且 u 满足下面的初值问题:

$$\begin{cases} u_t + F(u)_x = 0, x \in \mathbb{R}, t > 0, \\ u|_{t=0} = u_0(x), x \in \mathbb{R}. \end{cases}$$

且所有间断点都满足Osher熵条件, 则 u 也是这个初值问题的唯一解, 而且是这个初值问题的黏性消失解.

注: 这里“唯一性”是在弱解的意义下的, 不连续点具体情况如何我们并不关心.

有一些守恒律方程的 F 不是凸的, 比如Buckley-Leverett方程, 其中

$$F(u) = \frac{u^2}{u^2 + (1-u)^2/4},$$

区域是多孔介质. 类似于Osher熵条件, 有如下的非凸版本的熵条件(**Oleinik熵条件, 或熵条件 I_{nc}**):

定义 6.1.3 (Oleinik熵条件) 称方程(5)的解 $u = u(x, t)$ 满足Oleinik熵条件, 若界面移动速度 s 满足

$$\frac{F(u_L) - F(u)}{u_L - u} \geq s \geq \frac{F(u_R) - F(u)}{u_R - u}$$

其中 u_L, u_R 分别是间断点左侧与右侧的极限.

注: 如果 u 满足Oleinik熵条件, 那么守恒律方程的解也是存在唯一的, 而且是黏性消失解.

6.1.5 例题

Thomas书的90多页.

§ 6.2 守恒型差分格式

下面构造

$$u_t + f(u)_x = 0 \quad (1)$$

的差分格式, 如果 u 充分光滑, 它也等价于

$$u_t + a(u)u_x = 0, a(u) = f'(u). \quad (2)$$

设 $T_{\Delta x, \Delta t} = \{(x_j, t^n)\}_{\Delta x, \Delta t}$ 是等距时空网格, 网比 $\nu = \frac{\Delta t}{\Delta x}$. 我们希望构造高效的数值格式, 且对于激波等间断结构希望格式可以有健壮性.

6.2.1 基于光滑解的格式构造

利用系数冻结法, 可以得到(2)的迎风格式

$$u_j^{n+1} = \begin{cases} u_j^n - \nu a(u_j^n)(u_j^n - u_{j-1}^n), & a(u_j^n) \geq 0, \\ u_j^n - \nu a(u_j^n)(u_{j+1}^n - u_j^n), & a(u_j^n) < 0. \end{cases}$$

它无条件具有(1,1)阶局部截断误差. 用系数冻结法可以得到它的稳定性条件为

$$\max_{\forall j, \forall n} |a(u_j^n)| \Delta t \leq \Delta x. \quad (*)$$

用算术平均虚化离散焦点可以得到Lax格式

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2}(u_{j-1}^n + u_{j+1}^n) - \frac{1}{2}\nu a(u_j^n)[u_{j+1}^n - u_{j-1}^n].$$

当 ν 固定时, Lax格式有整体一阶的局部截断误差. 用系数冻结法可以得到它的稳定性条件为(*).

用时间Taylor法可以构造LW格式:

$$[u]_j^{n+1} = [u]_j^n + \Delta t [u_t]_j^n + \frac{1}{2}(\Delta t)^2 [u_{tt}]_j^n + O((\Delta t)^3).$$

用偏微分方程把时间方向导数转化为空间方向导数得到

$$\begin{aligned} [u_t]_j^n &= -[a(u)u_x]_j^n, \\ [u_{tt}]_j^n &= -[a'(u)u_t u_x]_j^n - [a(u)(u_t)_x]_j^n, \\ &= 2[a(u)a'(u)(u_x)^2]_j^n + [a^2(u)u_{xx}]_j^n. \end{aligned}$$

利用冻结系数法和中心差商离散空间导数, 用数值解代替真解可得LW格式

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{1}{2}\nu a_j^n(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + \frac{1}{2}(\nu a_j^n)^2 \delta_x^2 u_j^n + \frac{1}{4}\nu^2 b_j^n (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n)^2.$$

这里 $a_j^n = a(u_j^n)$, $b_j^n = a(u_j^n)a'(u_j^n)$. LW格式无条件有(2,2)阶局部截断误差, 而且它的 L^2 模稳定性的条件也是(*).

注: 守恒律问题也有线性不稳定现象, 如用Burgers方程的非守恒形式与系数冻结法, 蛙跳格式可以写成

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} - \nu u_j^n (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n).$$

定义空间网格函数

$$\{r_j\}_{\forall j} = (\cdots, 0, \varepsilon, -\varepsilon, 0, \varepsilon, -\varepsilon, 0, \cdots),$$

其中 $\varepsilon > 0, \gamma = \nu\varepsilon$, 若

$$c^{n+1} - c^{n-1} = \gamma(c^n)^2, n \geq 1,$$

则 $u_j^n = c^n r_j$ 满足蛙跳格式. 取 $c^0 = 1, c^1 = \alpha > 1$, 则

$$c^{2n} \geq (1 + \gamma)^n, c^{2n+1} \geq (1 + \gamma)^n, n \geq 0.$$

这样对任意网比, Burgers方程的上述蛙跳格式都是不稳定的. 但是, Burgers方程也可以写作

$$u_t + \frac{1}{3}uu_x + \frac{1}{3}(u^2)_x = 0,$$

此时蛙跳格式为

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} - \frac{\nu}{3}u_j^n(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) - \frac{\nu}{3}[(u_{j+1}^n)^2 - (u_{j-1}^n)^2],$$

它可以改善非线性因素造成的数值不稳定性, 所以非线性的数值离散要慎重处理.

6.2.2 基于守恒方程的数值格式

记 $f_j^n = f(u_j^n)$, 用上游信息对通量导数作单侧逼近得到迎风格式

$$u_j^{n+1} = \begin{cases} u_j^n - \nu[f_j^n - f_{j-1}^n], a(u_j^n) \geq 0, \\ u_j^n - \nu[f_{j+1}^n - f_j^n], a(u_j^n) < 0. \end{cases}$$

用算术平均技术改善中心差商全显格式的稳定性, 得到Lax格式

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2}(u_{j-1}^n + u_{j+1}^n) - \frac{1}{2}\nu[f_{j+1}^n - f_{j-1}^n].$$

迎风格式无条件一阶相容, 而Lax格式有条件整体一阶相容. 而它们的稳定性条件也是(*).

用时间Taylor法构造LW格式: 由于、

$$[u_{tt}] = -[f(u)_{tx}] = -[(a(u)u_t)_x] = [(a(u)f(u)_x)_x].$$

为了让空间导数的散度结构尽可能保持, 对上式用积分插值法可以得到

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\nu}{2}[f_{j+1}^n - f_{j-1}^n] + \frac{\nu^2}{2} \left[A_{j+\frac{1}{2}}^n [f_{j+1}^n - f_j^n] - A_{j-\frac{1}{2}}^n [f_j^n - f_{j-1}^n] \right].$$

其中 $A_{j+\frac{1}{2}}^n = a(u_{j+\frac{1}{2}}^n) = f' \left(\frac{1}{2}(u_j^n + u_{j+1}^n) \right)$. 根据构造过程, 它有二阶局部截断误差. 而 L^2 模与最大模稳定性的一个条件也是(*). (利用CFL方法或者冻结系数法)

注: CFL方法: 在 u_j^n 处特征线的斜率就是 $f'(u_j^n)$, 因此只需让

$$|f'(u_j^n)|\Delta t \leq \Delta x.$$

即可让数值依赖区域包含真实依赖区域.

6.2.3 守恒律方程组

记通量函数 $f: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ 的Jacobi矩阵

$$f'(u) = \left(\frac{\partial f_i}{\partial u_j} \right)_{i,j=1:m}$$

处处有 m 个互异特征值和 m 个线性无关特征向量, 则把

$$\mathbf{u}_t + \mathbf{f}(\mathbf{u})_x = 0$$

称为双曲守恒律组. 它有更复杂的熵解结构, 数值模拟面临更严峻的挑战.

设真解 \mathbf{u} 连续可微, 则存在可逆矩阵 $\mathbf{S}(\mathbf{u})$ 与对角阵 $\mathbf{D}(\mathbf{u})$, 使得

$$\mathbf{f}'(\mathbf{u}) = [\mathbf{S}(\mathbf{u})]^{-1} \mathbf{D}(\mathbf{u}) \mathbf{S}(\mathbf{u}).$$

则守恒律组可以改写为

$$\mathbf{S}(\mathbf{u})\mathbf{u}_t + \mathbf{D}(\mathbf{u})\mathbf{S}(\mathbf{u})\mathbf{u}_x = 0.$$

如果向量函数 $\mathbf{r}(\mathbf{u}) = (r_1, \dots, r_m)^T$ 满足

$$\mathbf{r}_t = \mathbf{S}(\mathbf{u})\mathbf{u}_t, \mathbf{r}_x = \mathbf{S}(\mathbf{u})\mathbf{u}_x$$

那么称其是双曲守恒律组的Riemann不变量. 这样就可以得到一个解耦的偏微分方程组

$$\mathbf{r}_t + \mathbf{D}(\mathbf{u})\mathbf{r}_x = 0.$$

但是 $\mathbf{D}(\mathbf{u})$ 的对角线元素与 $\{u_l\}_{l=1}^m$ 与 $\{u_r\}_{r=1}^m$ 的全分量, 所以上述方程组依然是耦合的.

注: 当 $m = 2$ 时Riemann不变量总是存在, $m > 2$ 时Riemann不变量可能不存在.

迎风格式的实现与局部解耦过程密切相关. 设 \mathbf{u}^n 已知, 以 (x_j, t^n) 为离散焦点, 用局部线性化技术和非线性双曲守恒律的特征形式, 把守恒律方程组近似为线性方程组

$$[\mathbf{v}_t] + \mathbf{D}(\mathbf{u}_j^n)[\mathbf{v}_x] = 0, \quad (3)$$

它关于变量 $[\mathbf{v}] = \mathbf{S}(\mathbf{u}_j^n)[\mathbf{u}]$ 完全解耦, 迎风离散的计算过程如下:

- 计算 $\mathbf{v}_j^n = \mathbf{S}(\mathbf{u}_j^n)\mathbf{u}_j^n$;
- 利用 $\mathbf{D}(\mathbf{u}_j^n)$ 判断当时当地的流场方向, 局部离散(3)可得

$$\mathbf{v}_j^{n+1} = \mathbf{v}_j^n - \nu \mathbf{D}^\oplus(\mathbf{u}_j^n)(\mathbf{v}_j^n - \mathbf{v}_{j-1}^n) - \nu \mathbf{D}^\ominus(\mathbf{u}_j^n)(\mathbf{v}_{j+1}^n - \mathbf{v}_j^n).$$

- 将上一步的 \mathbf{v}_j^{n+1} 逆映射到原始变量 \mathbf{u}_j^{n+1} :

$$\mathbf{u}_j^{n+1} = [\mathbf{S}(\mathbf{u}_j^n)]^{-1} \mathbf{v}_j^{n+1}.$$

上面的计算步骤很多, 计算效率极低.

某种程度上那些无需执行局部解耦的数值格式更受欢迎, 比如一阶Lax格式

$$\mathbf{u}_j^{n+1} = \frac{1}{2}(\mathbf{u}_{j-1}^n + \mathbf{u}_{j+1}^n) - \frac{\nu}{2}[\mathbf{f}(\mathbf{u}_{j+1}^n) - \mathbf{f}(\mathbf{u}_{j-1}^n)].$$

以及LW格式

$$\mathbf{u}_j^{n+1} = \mathbf{u}_j^n - \frac{\nu}{2}[\mathbf{f}(\mathbf{u}_{j+1}^n) - \mathbf{f}(\mathbf{u}_{j-1}^n)] + \frac{\nu^2}{2} \left[\mathbf{A}_{j+\frac{1}{2}}^n [\mathbf{f}(\mathbf{u}_{j+1}^n) - \mathbf{f}(\mathbf{u}_j^n)] - \mathbf{A}_{j-\frac{1}{2}}^n [\mathbf{f}(\mathbf{u}_j^n) - \mathbf{f}(\mathbf{u}_{j-1}^n)] \right].$$

其中

$$\mathbf{A}_{j+1/2}^n = \mathbf{f}'(\mathbf{u}_{j+1/2}^n) = \mathbf{f}'((\mathbf{u}_j^n + \mathbf{u}_{j+1}^n)/2).$$

是位于网格点中间的Jacobi矩阵.

但是计算Jacobi矩阵花费时间也很多, 为了提高计算效率, 人们提出了预测校正框架的两步LW格式:

(1) Richtmyer格式:

$$\begin{aligned} u_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{2}(u_j^n + u_{j+1}^n) - \frac{\nu}{2} [f(u_{j+1}^n) - f(u_j^n)] \\ u_j^{n+1} &= u_j^n - \nu [f(u_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}) - f(u_{j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}})] \end{aligned}$$

(2) MacCormack格式:

$$\begin{aligned} \tilde{u}_j^n &= u_j^n - \nu [f(u_{j+1}^n) - f(u_j^n)] \\ u_j^{n+1} &= \frac{1}{2}(u_j^n + \tilde{u}_j^n) - \frac{\nu}{2} [f(\tilde{u}_j^n) - f(\tilde{u}_{j-1}^n)] \end{aligned}$$

当 $f(u) = Au$ 时, 两个格式均为 LW 格式.

6.2.4 数值格式的健壮性

例 6.2.1 考虑 Burgers 方程 $u_t + (u^2/2)_x = 0$, 初始状态是 $u_L = 1, u_R = 0$, 相应真解是右行速度为 $1/2$ 的激波, 定义初值为

$$u_j^0 = 1, j \leq 0; u_j^0 = 0, j > 0.$$

考察非守恒迎风格式与守恒迎风格式的数值结果:

计算可知, 两个格式的数值解在任意时刻都等于初值! 数值间断界面没有移动, 所以数值解违背了 RH 条件, 它的极限不可能是弱解. \square

注: 当熵解含有间断点时, 非守恒形式与守恒形式不再等价, 前者无法刻画局部守恒性质.

我们希望构造的数值格式可以保持局部守恒性质, 数值保持 RH 跳跃条件. 于是有如下定义:

定义 6.2.1 称差分格式是**守恒型格式**, 若它可以统一表述为

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [\hat{f}_{j+1/2}^n - \hat{f}_{j-1/2}^n], \forall j.$$

把 $\hat{f}_{j+1/2}^n$ 称为**数值通量**, 它有相同的表达方式:

$$\hat{f}_{j+1/2}^n = \hat{f}(u_{j-l+1}^n, u_{j-l+2}^n, \dots, u_j^n, u_{j+1}^n, \dots, u_{j+r}^n).$$

这里 l, r 都是正整数, \hat{f} 是给定的数值通量函数.

注: 守恒型格式的数值解必定满足**局部守恒性质**:

$$\sum_{j=p}^q u_j^{n+1} = \sum_{j=p}^q u_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [\hat{f}_{q+1/2}^n - \hat{f}_{p-1/2}^n], \forall p, q.$$

数值通量函数与守恒型格式一一对应, 通常满足下列两种性质:

- 关于每个变元都是局部 Lipschitz 连续 (对舍入误差有连续依赖性).
- 相容性条件, 即常数解要准确: $\hat{f}(p, \dots, p) = f(p)$.

最简单的定义方式就是仅仅依赖左右网格点值的两点型数值通量

$$\hat{f}_{j+1/2}^n \equiv \hat{f}(u_j^n, u_{j+1}^n).$$

例 6.2.2 Lax 格式

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2}(u_{j-1}^n + u_{j+1}^n) - \frac{1}{2}\nu[f_{j+1}^n - f_{j-1}^n].$$

与 LW 格式

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\nu}{2}[f_{j+1}^n - f_{j-1}^n] + \frac{\nu^2}{2} [A_{j+\frac{1}{2}}^n [f_{j+1}^n - f_j^n] - A_{j-\frac{1}{2}}^n [f_j^n - f_{j-1}^n]].$$

都是守恒型的, 其中 $A_{j+\frac{1}{2}}^n = a(u_{j+\frac{1}{2}}^n) = f' \left(\frac{1}{2}(u_j^n + u_{j+1}^n) \right)$,

Lax格式与LW格式的数值通量分别为:

$$(\hat{f}^{Lax})_{j+1/2}^n = \frac{1}{2}[f_j^n + f_{j+1}^n] - \frac{1}{2\nu}(u_{j+1}^n - u_j^n).$$

以及

$$(\hat{f}^{LW})_{j+1/2}^n = \frac{1}{2}[f_j^n + f_{j+1}^n] - \frac{\nu}{2}A_{j+1/2}^n[f_{j+1}^n - f_j^n].$$

容易验证两个数值通量函数都满足局部Lipschitz连续性与相容性条件. □

§ 6.3 有限体积法

6.3.1 基本思想

发展型偏微分方程的有限体积格式需要同时离散时间变量和空间变量. 操作过程如下:

(1)把空间区域分割为互不重叠的一组工作单元, 形成所谓的单元剖分. 对于一维空间而言, 单元剖分是

$$T_{\Delta x} = \{I_j = (x_{j-1/2}, x_{j+1/2})\}_{\forall j},$$

把 I_j 称为**工作单元**, $\Delta x_j = x_{j+1/2} - x_{j-1/2}$ 称为 I_j 的**单元长度**. 把 $\Delta x = \max_{\forall j} \Delta x_j$ 称为**单元剖分的参数**.

(2)把时间区间离散为有限个点, 构造时间网格 $T_{\Delta t} = \{t^n\}_{n \geq 0}$, 其中 $\Delta t^n = t^{n+1} - t^n$ 叫**局部时间步长**, $\Delta t = \max_{\forall n} \Delta t^n$ 是**时间步长**.

有限体积法中数值求解的目标就是算均值:

$$[\bar{u}]_j^n = \frac{1}{\Delta x_j} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} u(x, t^n) dx, \forall j \forall n.$$

在区域 $\Omega_j^n = [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}] \times [t^n, t^{n+1}]$ 内对守恒律方程 $u_t + f(u)_x = 0$ 作积分, 得到

$$0 = \int_{\Omega_j^n} (u_t + f(u)_x) dx dt = \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} [u(t^{n+1}) - u(t^n)] dx + \int_{t^n}^{t^{n+1}} [f(u_{j+1/2}) - f(u_{j-1/2})] dt.$$

记单元界面 $x_{j+1/2}$ 的**真实平均通量**为

$$F_{j+1/2}^n \equiv \frac{1}{\Delta t^n} \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(u(x_{j+1/2}, t)) dt,$$

则

$$[\bar{u}]_j^{n+1} = [\bar{u}]_j^n - \frac{\Delta t^n}{\Delta x_j} (F_{j+1/2}^n - F_{j-1/2}^n).$$

如果存在某个数值通量函数 H 使得

$$F_{j+1/2}^n \approx H([\bar{u}]_{j-l+1}^n, \dots, [\bar{u}]_{j+r}^n),$$

其中 l, r 是给定正整数, 用数值均值 \bar{u}_j^n 代替真实均值 $[\bar{u}]_j^n$, 记**数值通量**为

$$\hat{f}_{j+1/2}^n = H(\bar{u}_{j-l+1}^n, \dots, \bar{u}_{j+r}^n),$$

那么就可以得到有限体积格式

$$\bar{u}_j^{n+1} = \bar{u}_j^n - \frac{\Delta t^n}{\Delta x_j} \left[\hat{f}_{j+1/2}^n - \hat{f}_{j-1/2}^n \right].$$

通常把 H 定义为两点型数值通量

$$\hat{f}_{j+1/2}^n = H(\bar{u}_j^n, \bar{u}_{j+1}^n).$$

也就是说数值通量仅依赖单元界面两侧的单元均值.

6.3.2 线性问题的有限体积格式

设 $f(u) = au$, a 是给定常数. 为了方便, 设离散网格是均匀的, 工作单元长度都是 Δx , 局部时间步长是 Δt , 构造迎风有限体积格式, 只需定义数值通量为

$$\begin{aligned} (\hat{f}^{upw})_{j+1/2}^{n+1} &= \begin{cases} a\bar{u}_j^n, & a \geq 0, \\ a\bar{u}_{j+1}^n, & a < 0, \end{cases} &= \frac{a + |a|}{2} \bar{u}_j^n + \frac{a - |a|}{2} \bar{u}_{j+1}^n \\ &= \frac{a\bar{u}_j^n + a\bar{u}_{j+1}^n}{2} - \frac{|a|}{2} [\bar{u}_{j+1}^n - \bar{u}_j^n]. \end{aligned}$$

再代入前面的式子即可得到迎风有限体积格式:

$$\frac{\bar{u}_j^{n+1} - \bar{u}_j^n}{\Delta t} + \frac{a + |a|}{2\Delta x} [\bar{u}_j^n - \bar{u}_{j-1}^n] + \frac{a - |a|}{2\Delta x} [\bar{u}_{j+1}^n - \bar{u}_j^n] = 0.$$

把 \bar{u} 换成 u 其实也得到了迎风格式.

Lax格式的数值通量为

$$(\hat{f}^{Lx})_{j+1/2}^n = \frac{a\bar{u}_j^n + a\bar{u}_{j+1}^n}{2} - \frac{\Delta x}{2\Delta t} [\bar{u}_{j+1}^n - \bar{u}_j^n].$$

Lax有限体积格式为

$$\bar{u}_j^{n+1} = \frac{1}{2}(\bar{u}_{j-1}^n + \bar{u}_{j+1}^n) - \frac{a\Delta t}{2\Delta x} (\bar{u}_{j+1}^n - \bar{u}_{j-1}^n).$$

LW格式的数值通量为

$$\hat{f}_{j+\frac{1}{2}}^n = \frac{a}{2} [\bar{u}_j^n + \bar{u}_{j+1}^n] - \frac{a^2\Delta t}{2\Delta x} [\bar{u}_{j+1}^n - \bar{u}_j^n].$$

有限体积格式为

$$\bar{u}_j^{n+1} = \bar{u}_j^n - \frac{a\Delta t}{2\Delta x} (\bar{u}_{j+1}^n - \bar{u}_{j-1}^n) - \frac{a^2\Delta t}{\Delta x} [\bar{u}_{j+1}^n + \bar{u}_{j-1}^n - 2\bar{u}_j^n].$$

注: 迎风、Lax、LW格式都可以看作是中心差商格式作黏性修正得到,

注: 当函数足够光滑时, 单元均值与中心点值的差距是 $O((\Delta x)^2)$, 所以相容阶不超过2的有限差分格式可以理解有限体积格式, 相应数值结果与理论没有根本变化. 但是有限体积格式的收敛性证明需要借用有限元方法的分析技术, 尤其是当单元剖分不是均匀的时候.

有限体积法与有限差分法高度相似, 都是基于PDE在局部区域的积分近似过程.

例 6.3.1 设 $T_{\Delta x, \Delta t} = \{(x_j, t^n)\}_{\forall j}^n$ 是等距时空网格, 用积分插值方法构造 $u_t + au_x = 0 (a > 0)$ 的迎风有限差分格式.

答: 在局部区域 $(x_{j-1}, x_j) \times (t^n, t^{n+1})$ 积分, 可得

$$\int_{x_{j-1}}^{x_j} [u(x, t^{n+1}) - u(x, t^n)] dx + a \int_{t^n}^{t^{n+1}} [u(x_j, t) - u(x_{j-1}, t)] dt = 0.$$

第一个积分用右矩形公式, 第二个积分用左矩形公式, 并用数值解代替真解, 即可得到迎风格式. □

注: 在局部区域 $(x_{j-1}, x_{j+1}) \times (t^n, t^{n+1})$ 积分, 并用数值积分公式逼近, 同样可以得到Lax格式.

6.3.3 非线性问题的有限体积格式

为简单起见, 设离散网格是一致(等距)的. 构造 $u_t + f(u)_x = 0$ 的有限体积格式.

记 $\{\{\bar{u}\}\}_{j+1/2}^n = \frac{1}{2}(\bar{u}_j^n + \bar{u}_{j+1}^n)$ 表示两侧单元均值的算术平均. 在 t^n 时刻, 位于单元界面 $x_{j+1/2}$ 的流速定义为

$$A_{j+1/2}^n = f'(\{\{\bar{u}\}\}_{j+1/2}^n).$$

利用流速的方向来判断当地的上游方向, 记迎风数值通量为

$$\hat{f}_{j+1/2}^n = \begin{cases} f_j^n, & A_{j+1/2}^n > 0, \\ f_{j+1}^n, & A_{j+1/2}^n \leq 0. \end{cases} = \frac{1}{2}[f_j^n + f_{j+1}^n] - \frac{1}{2}\text{sgn}A_{j+1/2}^n(f_{j+1}^n - f_j^n).$$

其中, $f_j^n = f(\bar{u}_j^n)$, 代入基本框架, 则相应的守恒型迎风格式为

$$\bar{u}_j^{n+1} = \bar{u}_j^n - \frac{\nu}{2} \left\{ \left[1 - \text{sgn}A_{j+1/2}^n \right] (f_{j+1}^n - f_j^n) + \left[1 + \text{sgn}A_{j-1/2}^n \right] (f_j^n - f_{j-1}^n) \right\}.$$

如果把单元均值 \bar{u}_j^n 看作中心点值 u_j^n , 可以得到守恒型迎风格式:

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\nu}{2} \left\{ \left[1 - \text{sgn}A_{j+1/2}^n \right] (f_{j+1}^n - f_j^n) + \left[1 + \text{sgn}A_{j-1/2}^n \right] (f_j^n - f_{j-1}^n) \right\}.$$

其中, $A_{j+1/2}^n = f'((u_j^n + u_{j+1}^n)/2)$, $f_j^n = f(u_j^n)$.

注: 在前面我们给出了基于非守恒方程的简单的迎风格式, 它不是守恒型格式, 数值解不一定收敛于真解. 两个格式的区别在于上游方向判断位置不同. 守恒型格式基于控制区域的界面位置, 而简单迎风格式基于网格点位置. 当流场方向发生变化时, 它们会有所区别.

下面构造 $u_t + f(u)_x$ 的有限体积格式. 我们对真实平均通量作一个高阶近似来实现它:

$$\begin{aligned} \hat{F}_{j+1/2}^n &\triangleq \frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(u(x_{j+1/2}, t)) dt \\ &= f([u]_{j+1/2}^{n+1/2}) + O(\Delta t)^2 \\ &= f([u]_{j+1/2}^n) - \frac{\Delta t}{2} f'([u]_{j+1/2}^n) [f(u)_x]_{j+1/2}^n + O((\Delta t)^2). \end{aligned}$$

再利用单元中心点值与单元均值的二阶逼近性质, 利用算术平均和中心差商得到

$$\begin{aligned} f([u]_{j+\frac{1}{2}}^n) &= \frac{1}{2} [f([\bar{u}]_{j+1}^n) + f([\bar{u}]_j^n)] + O((\Delta x)^2), \\ f'([u]_{j+\frac{1}{2}}^n) &= f'(\{\{\bar{u}\}\}_{j+\frac{1}{2}}^n) + O((\Delta x)^2). \\ [f(u)_x]_{j+\frac{1}{2}}^n &= \frac{1}{\Delta x} [f([\bar{u}]_{j+1}^n) - f([\bar{u}]_j^n)] + O(\Delta x)^2. \end{aligned}$$

所以真实平均通量可以如下近似:

$$F_{j+1/2}^n = H([\bar{u}]_j^n, [\bar{u}]_{j+1}^n) + O((\Delta x)^2 + (\Delta t)^2),$$

其中,

$$H(a, b) = \frac{1}{2}(f(a) + f(b)) - \frac{\nu}{2} f' \left(\frac{a+b}{2} \right) (f(b) - f(a)).$$

代入基本框架可得LW有限体积格式

$$\bar{u}_j^{n+1} = \bar{u}_j^n - \frac{\nu}{2} \left\{ \left[1 - \nu A_{j+1/2}^n \right] (f_{j+1}^n - f_j^n) + \left[1 + \nu A_{j-1/2}^n \right] (f_j^n - f_{j-1}^n) \right\}.$$

其中, $f_j^n = f(\bar{u}_j^n)$, $A_{j+1/2}^n = f'(\{\{\bar{u}\}\}_{j+1/2}^n)$.

注: 类似可以推出Lax有限体积格式

$$\bar{u}_j^{n+1} = \frac{1}{2}(\bar{u}_{j+1}^n + \bar{u}_{j-1}^n) - \frac{\nu}{2} (f(\bar{u}_{j+1}^n) - f(\bar{u}_{j-1}^n)).$$

6.3.4 Godunov方法

待补充.