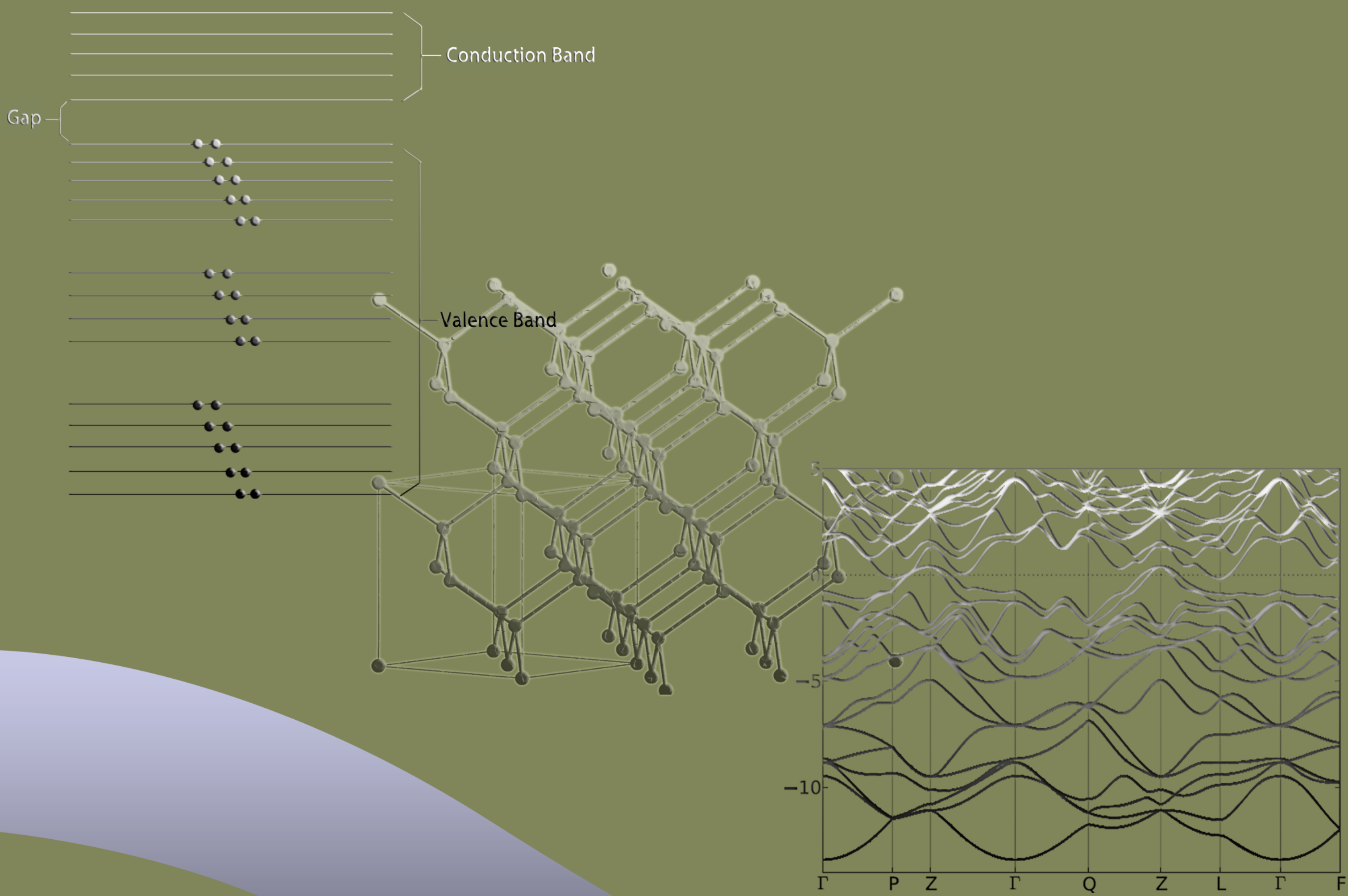
Queen Mary, University of London

School of Physics and Astronomy

有限差分方法简要总结



一、 有限差分概要

在求解物理以及其他学科领域的很多问题过程中，求解的关键往往归结为对常微分方程或者偏微分方程的求解，而除了少数可以解析求解的微分方程形式之外的很多微分方程，只能采用数值解法进行求解，有限差分方法就是一种常用的数值求解微分方程的方法。有限差分方法的理论基础就是函数值在临近点的Taylor展开，其具体操作步骤分为两部分：

1) 将求解区域离散化，并利用相应的差分形式代替方程中的微分形式；

2) 求解差分方程组得到离散点的函数值；

首先给出x_i点函数值在相邻两点的Taylor展开式：

$$f(x_i-h)=f(x_i)-hf'(x_i)+\frac{h^2}{2}f''(x_i)-\frac{h^3}{3!}f'''(x_i)+\frac{h^4}{4!}(x_i)f''''(x_i)-\cdots \tag{1-1}$$

$$f(x_i+h)=f(x_i)+hf'(x_i)+\frac{h^2}{2}f''(x_i)+\frac{h^3}{3!}f'''(x_i)+\frac{h^4}{4!}(x_i)f''''(x_i)+\cdots \tag{1-2}$$

(1-2) - (1-1)，并忽略包括h的平方项在内的高阶项可得：

$$f'(x_i)\approx\frac{f(x_i+h)-f(x_i-h)}{2h} \tag{1-3}$$

同时利用式（1-2）与（1-1）还可以分别得到x_i点的向前（forward）及向后（backward）一阶微商：

$$f'(x_i)\approx\frac{f(x_i+h)-f(x_i)}{h} \tag{1-4}$$

$$f'(x_i)\approx\frac{f(x_i)-f(x_i-h)}{h} \tag{1-5}$$

将式（1-2）与（1-1）相加，同样忽略h的平方项及高阶项可得到x_i点二阶微商的表示式：

$$f''\approx\frac{f(x_i+h)-2f(x_i)+f(x_i-h)}{h^2} \tag{1-6}$$

以上给出的是有限差分方法的微分学基础，后面所有给出的处理都是在此基础上进行的，有限差分方法还有另外一个重要的处理，就是求解区域的离散化，即分割求解区域并构造离散点微商的表示式将微分方程将阶为简单的线性方程组，这里给出分割的基本模式如图一所示，将求解区域进行分割，得到分割区域的边界点，称为节点（图中用数字代表），相邻两个节点之间的距离用h_1、h_2、h_3以及h_4表示，后面的讨论过程中在式（1-3）至（1-6）的基础上，可以将节点0处的微商与临近4 个节点函数值建立相应的关系式，同时用角标（图一中的i，j）代替节点编号可以得到有限差分方法的基本线性方程组。

这里以Laplace算符在节点0处作用在函数$f=f(x,y)$上为例说明有限差分的原理，即Laplace算符作用在函数f上，得到的微商函数在节点0处的函数值可以用临近节点的原函数值表示（这里假

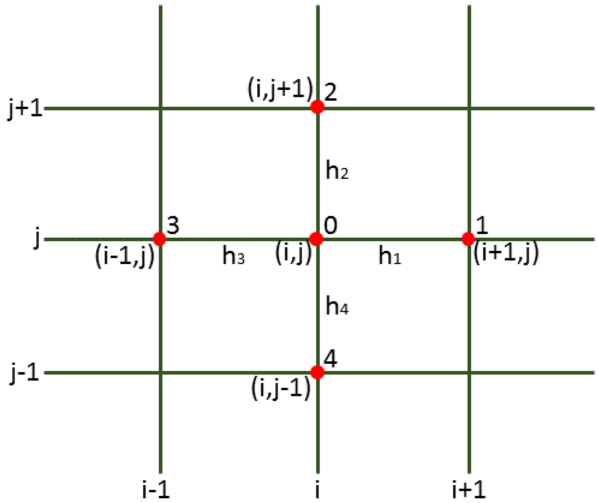


图 一 有限差分方法分割图示

设图一中$h_1 = h_2 = h_3 = h_4$)：

$$f_3 + f_1 \approx 2f_0 + h^2 f_{xx} + \frac{2h^4}{4!} f_{xxxx} \tag{1-7}$$

$$f_4 + f_2 \approx 2f_0 + h^2 f_{yy} + \frac{2h^4}{4!} f_{yyyy} \tag{1-8}$$

$$\Rightarrow$$

$$\nabla^2 f \approx \frac{f_1 + f_2 + f_3 + f_4 - 4f_0}{h^2} - \frac{2h^2}{4!}(\frac{\partial^4 f}{\partial x^4} + \frac{\partial^4 f}{\partial y^4}) \tag{1-9}$$

如果忽略式（1-9）中的4阶项，则可以得到Laplace算符作用在函数f上得到的在节点0函数值的表示式：

$$\nabla^2 f \approx \frac{f_1 + f_2 + f_3 + f_4 - 4f_0}{h^2} \tag{1-10}$$

二、 微分方程基本形式及边界条件

微分方程的普适表示形式为：

$$L\phi = q \tag{2-1}$$

其中L为含有微分形式的算符，q为一般的函数形式，在众多的微分方程形式中，有一种特殊的微分方程在流体力学、等离子物理、天体物理等众多领域有着广泛的应用，这种微分方程对应的L算符为：

$$L \equiv -\nabla(p\nabla) + f \tag{2-2}$$

这种形式的算符L称为斯杜-刘维尔（Strum-Liouville）算符，当$p = 1, f = 0$时，可以得到方程（2-1）的一种特殊情况——泊松方程：

$$\nabla^2\phi = q \tag{2-3}$$

在此基础上如果有$q=0$，则可以得到Laplace方程：

$$\nabla^2\phi = 0 \tag{2-4}$$

另外一种常见的微分方程形式中有，p为常数（此处取$p=1$，且f可不为0）：

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 y}{\partial y^2} + f(x,y)\phi = q(x,y) \tag{2-5}$$

给定一个微分方程，如果想要得到确定解，则必须给定相应求解区域的边界条件，一般的边界条件可以写为：

$$\phi|_G + g_1(s)\frac{\partial\phi}{\partial n}|_G = g_2(s) \tag{2-6}$$

其中G表示求解区域D的边界，$g_1(s)$, $g_2(s)$为边界上的逐点函数，根据边界条件形式的不同可以将边界条件分为三类：

(1) 第一类边界条件，也称为狄利克莱（Dirichlet）问题（$g_1(s)=0$, $g_2(s)\neq 0$）：

$$\phi|_G = g(s) \tag{2-7}$$

(2) 第二类边界条件，也成为诺依曼（Neumann）问题（$g_1(s)\neq 0$, $g_2=0$）：

$$\frac{\partial\phi}{\partial n}|_G = g(s) \tag{2-8}$$

(3) 第三类边界条件，也成为混合问题（$g_1(s)\neq 0$, $g_2(s)\neq 0$）：

三、 有限差分方程的一般形式

按照图一所示的分割方式，式（1-10）已经给出了Laplace算符的差分表示形式，但是得到式（1-10）的基础是分割间隔在各个方向上均相等（$h_1=h_2=h_3=h_4=h$），一般情况下各个方向上分割间隔不相等的情况下，可以给出此时二维情况下在x方向以及y 方向上一阶及二阶微商表示的一般形式（这里只给出表达式，具体的推导详见有限差分方法一文Page9-11）：

$$(\frac{\partial\phi}{\partial x})_0 \approx \frac{h_3^2(\phi_1-\phi_0)-h_1^2(\phi_3-\phi_0)}{h_1h_3(h_1+h_3)} \tag{3-1}$$

$$(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2})_0 \approx 2\frac{h_3(\phi_1-\phi_0)+h_1(\phi_3-\phi_0)}{h_1h_3(h_1+h_3)} \tag{3-2}$$

$$(\frac{\partial\phi}{\partial y})_0 \approx \frac{h_4^2(\phi_2-\phi_0)-h_2^2(\phi_4-\phi_0)}{h_2h_4(h_2+h_4)} \tag{3-3}$$

$$(\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2})_0 \approx 2\frac{h_4(\phi_2-\phi_0)+h_2(\phi_4-\phi_0)}{h_2h_4(h_2+h_4)} \tag{3-4}$$

将式（3-2）与（3-4）带入式（2-5）对应的微分方程的一般形式，并用角标代替节点编号可以得到：

$$\begin{aligned}(\nabla^2\phi)_{i,j} = 2[&\frac{h_3(\phi_{i+1,j}-\phi_{i,j})+h_1(\phi_{i-1,j}-\phi_{i,j})}{h_1h_3(h_1+h_3)} \\ &+\frac{h_4(\phi_{i,j+1}-\phi_{i,j})+h_2(\phi_{i,j-1}-\phi_{i,j})}{h_2h_4(h_2+h_4)}] + f_{i,j}\phi_{i,j} \\ =\ & q_{i,j}\end{aligned} \tag{3-5}$$

当分割间隔$h_1 = h_2 = h_3 = h_4 = h$时，可以得到方程（2-5）的一般差分形式：

$$\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1} + (h^2 f_{i,j} - 4)\phi_{i,j} = h^2 q_{i,j} \tag{3-6}$$

当$f = 0$时，可以得到泊松方程的一般差分形式：

$$\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1} - 4\phi_{i,j} = h^2 q_{i,j} \tag{3-7}$$

当$f = g = 0$时，可以得到Laplace方程的一般差分形式：

$$\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1} - 4\phi_{i,j} = 0 \tag{3-8}$$

四、 有限差分方程的解法

考虑式（3-6），同时为简单起见考虑第一类边界条件（关于第二以及第三类边界条件将在后续的讨论中给出说明），可以得到相应的差分方程组：

$$\phi_{i,j} - \frac{1}{4 - h^2 f_{i,j}}(\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1}) = \frac{h^2}{4 - h^2 f_{i,j}} q_{i,j} \text{ ，在求解区域D内} \tag{4-1}$$

$$\phi_{i,j} = g_{i,j} \text{ ，在求解区域D的边界G上} \tag{4-2}$$

这里首先要对求解区域进行横向及纵向分割，假定横向纵向分别有N个分割区间，相邻节点间隔为h（横向与纵向相等，且各自均为等距分割，即$h_1 = h_2 = h_3 = h_4 = h$），包括边界点在内横向与纵向分别有$N+1$个节点，除去边界点则各有$N-1$个节点，同时需要指出，这里暂不考虑分割节点不落在边界上的一般情况（这一情况将在后面的讨论中进行简要说明），为了求解由式（4-1）与（4-2）组成的差分方程组，需要引入上述方程组的矩阵形式，首先给出y 方向上层向量ϕ_j 以及q_j 的定义：

$$\phi_j = \begin{bmatrix} \phi_{1,j} \\ \phi_{2,j} \\ \vdots \\ \phi_{N-1,j} \end{bmatrix}, \qquad q_j = -\frac{h^2}{4 - h^2 f_{i,j}} \begin{bmatrix} q_{1,j} \\ q_{2,j} \\ \vdots \\ q_{N-1,j} \end{bmatrix} \tag{4-3}$$

并记：

$$\phi = \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_{N-1} \end{bmatrix}, \qquad B = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{N-1} \end{bmatrix} \tag{4-4}$$

这里的B需要进行说明，b_j向量是在q_j向量的基础上结合边界条件构造的新向量，譬如对于b_1、b_2分别有：

$$b_1 = -\frac{1}{4-h^2 f_{i,j}} \begin{bmatrix} h^2 q_{1,1} - g_{0,1} - g_{1,0} \\ h^2 q_{2,1} - g_{2,0} \\ \vdots \\ h^2 q_{N-1,1} - g_{N-1,1} - q_{N-1,0} \end{bmatrix},\ b_2 = -\frac{1}{4-h^2 f_{i,j}} \begin{bmatrix} h^2 q_{1,2} - g_{0,2} \\ h^2 q_{2,2} \\ \vdots \\ h^2 q_{N-1,2} - q_{N,2} \end{bmatrix} \tag{4-5}$$

实际上可以定性的理解为从q_j的分量中扣除与对应点相邻的边界点的函数值，这样构造的原因可以从下面给出的差分方程组矩阵表示的最终形式看出，在式（4-3）至（4-5）的基础上，方程组（4-1）&（4-2）可以写为：

$$K\Phi = B \tag{4-6}$$

其中K矩阵的形式为：

$$K = \begin{bmatrix} G & -I/(4-h^2 f_{i,j}) & \cdots & 0 \\ -I/(4-h^2 f_{i,j}) & G & -I/(4-h^2 f_{i,j}) & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & -I/(4-h^2 f_{i,j}) \\ 0 & \cdots & -I/(4-h^2 f_{i,j}) & G \end{bmatrix} \tag{4-7}$$

I为$(N-1)^2$阶单位阵，而G为$(N-1)^2$阶方阵，表示形式为：

$$G = \begin{bmatrix} 1 & -1/(4-h^2 f_{i,j}) & \cdots & 0 \\ -1/(4-h^2 f_{i,j}) & 1 & -1/(4-h^2 f_{i,j}) & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & -1/(4-h^2 f_{i,j}) \\ 0 & \cdots & -1/(4-h^2 f_{i,j}) & 1 \end{bmatrix} \tag{4-8}$$

式（4-3）至（4-8）就是利用有限差分方法得到的微分方程（3-6）的差分方程组的矩阵形式，这里以$y=h$上各个节点给出的差分方程为例说明上述矩阵表示完全可以还原回一般形式的方程组（式-4-1&4-2），首先由$K\Phi = B$可得：

$$G\phi_1 - \frac{1}{4-h^2 f_{i,j}} I\phi_2 = b_1 \tag{4-9}$$

将G（式-4-8）、I、ϕ_1&ϕ_2（式-4-3）以及b_1（式-4-5）的形式带入式（4-9）可以得到：

$$\begin{bmatrix} 1 & -1/(4-h^2 f_{i,j}) & \cdots & 0 \\ -1/(4-h^2 f_{i,j}) & 1 & -1/(4-h^2 f_{i,j}) & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & -1/(4-h^2 f_{i,j}) \\ 0 & \cdots & -1/(4-h^2 f_{i,j}) & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{1,1} \\ \phi_{2,1} \\ \vdots \\ \phi_{N-1,1} \end{bmatrix}$$

$$-\frac{1}{4-h^2 f_{i,j}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{1,2} \\ \phi_{2,2} \\ \vdots \\ \phi_{N-1,2} \end{bmatrix} = \frac{1}{4-h^2 f_{i,j}} \begin{bmatrix} h^2 q_{1,1} - g_{0,1} - g_{1,0} \\ h^2 q_{2,1} - g_{2,0} \\ \vdots \\ h^2 q_{N-1,1} - g_{N-1,1} - q_{N-1,0} \end{bmatrix} = b_1 \tag{4-10}$$

写出式（4-10）左右两边列向量的第一个分量可以得到：

$$\phi_{1,1}-\frac{1}{4-h^2f_{i,j}}\phi_{2,1}-\frac{1}{4-h^2f_{i,j}}\phi_{1,2}$$
$$=-\frac{1}{4-h^2f_{i,j}}h^2q_{1,1}+\frac{1}{4-h^2f_{i,j}}g_{0,1}+\frac{1}{4-h^2f_{i,j}}g_{1,0} \tag{4-11}$$

重新整理式（4-11）可以得到：

$$g_{0,1}+\phi_{2,1}+g_{1,0}+\phi_{1,2}+(4-h^2f_{i,j})\phi_{1,1}=h^2q_{1,1} \tag{4-12}$$

这就是方程3-6在分割区域其中一个顶角的具体形式，由此可见，差分方程组的矩阵形式4-6可以完全退化为一般形式的方程组表示，同样也可以看出包括式（4-4）及（4-5）定义的向量B在内的所有定义形式（式4-3至4-8）对于给出最终差分方程组矩阵表示形式的必要性。

得到了有限差分线性方程组，首先想到的解法便是通过求解系数矩阵K的逆矩阵来得到方程（4-6）的解：

$$\Phi=K^{-1}B \tag{4-13}$$

这就是所谓的直接法求解，但是实际问题中的K矩阵通常都很大，而且还存在逆矩阵求解过程中可能由舍入误差等造成的解的不稳定性，因此直接法求解的问题非常有限，另外一种方法是随机游动法，涉及蒙特卡洛方法的应用，此处不做介绍，此外常用的方法就是迭代法，其中由包括直接迭代法，高斯-赛德尔迭代法以及超松弛迭代法，首先对于直接迭代法，直接将方程（3-6）写成：

$$\phi_{i,j}^{(k+1)}=\frac{1}{4-h^2f_{i,j}}[\phi_{i+1,j}^{(k)}+\phi_{i-1,j}^{(k)}+\phi_{i,j+1}^{(k)}+\phi_{i,j-1}^{(k)}-h^2q_{i,j}] \tag{4-14}$$

这样给定每一个节点函数值的初始值，带入式（4-14）的右端，则可以经过第一次迭代得到的各个节点的函数值$\phi_{i,j}^{(k)}$，然后不断的进行循环，给出第k次迭代得到的各个节点函数值，就可以按照式（4-14）给出的方法求得第$k+1$次迭代的结果，这种计算方法的缺点是需要占用的内存资源大，收敛速度慢，而高斯-赛德尔方法则是在直接迭代法的基础上进行改进的方法，首先给出相应表达式：

$$\phi_{i,j}^{(k+1)}=\frac{1}{4-h^2f_{i,j}}[\phi_{i+1,j}^{(k)}+\phi_{i,j+1}^{(k)}+\phi_{i-1,j}^{(k+1)}+\phi_{i,j-1}^{(k+1)}-h^2q_{i,j}] \tag{4-15}$$

与直接迭代法不同的是，式（4-15）给出的计算方法在计算第$k+1$次迭代(i,j)节点函数值时，利用了临近节点中已经求得的第$(k+1)$次迭代值，这就是高斯-赛德尔迭代法，与直接迭代法相比，高斯-赛德尔迭代法的收敛速度显然更快，最后一种迭代方法是超松弛迭代法，该方法是将式（4-15）作为一个中间结果，将其与直接迭代法的式（4-14）进行加权平均得到：

$$\phi_{i,j}^{(k+1)}=\phi_{i,j}^{(k)}+\omega(\phi_{i,j-gs}^{(k+1)}-\phi_{i,j}^{(k)})=\omega\phi_{i,j-gs}^{(k+1)}+(1-\omega)\phi_{i,j}^{(k)}$$
$$=\phi_{i,j}^{(k)}+\frac{\omega}{4-h^2f_{i,j}}[\phi_{i+1,j}^{(k)}+\phi_{i,j+1}^{(k)}+\phi_{i-1,j}^{(k+1)}+\phi_{i,j-1}^{(k+1)}-h^2q_{i,j}-(4-h^2f_{i,j})\phi_{i,j}^{(k)}] \tag{4-16}$$

以上便是有限差分线性方程组的几种常见的解法，而且上述几种解法的介绍中针对的是一般形式的方程（3-6），对于泊松方程以及Laplace方程，令相应的求解方法表达式中的$f=0$或$f,g=0$即可。

最后回到第四部分一开始提到的第二类及第三类边界条件，以及分割节点不落在边界上的情况（这一情况对于边界不规则的情形非常常见），无论对于哪一种情况，最终的目的都是寻找一个能够替代式（4-2）的表达式以和式（4-1）构成完整线性方程组，对于第二类以及第三类边界条件问题，可以利用差分方法将微分形式的边界条件转化成边界点函数值的形式进而取代式（4-2），这样就可以完成微分方程组的求解，而对于分割节点不落在边界的情况，则需要通过相应的插值方法获得与边界临近的节点的近似函数值作为后续求解过程的边界条件，接下来的求解步骤就与正常的情况完全相同，至此便给出了有限差分方法求解微分方程的基本过程及形式。