

偏微分方程数值解法笔记

Numerical Methods for PDE Notes

丁毅

中国科学院大学，北京 100049

Yi Ding

University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

2024.8 – 2025.1

序言

本文为笔者本科时的偏微分方程数值解法（Numerical Methods for PDE）笔记。用灰色字体或灰色方框等表示对主干内容的补充、对晦涩概念的理解、定理的具体证明过程等，采用红色字体对重点部分进行强调，同时适当配有插图。这样的颜色和结构安排既突出了知识的主要框架，也保持了笔记的深度和广度，并且不会因为颜色过多而导致难以锁定文本内容，乃是尝试了多种安排后挑选出的最佳方案。如果读者有更佳的颜色和排版方案，可以将建议发送到笔者邮箱 dingyi233@mails.ucas.ac.cn，在此感谢。另外，由于个人自学能力有限，部分内容将会直接跳过。

由于个人学识浅陋，认识有限，书中难免有不妥甚至错误之处，望读者不吝指正，在此感谢。

目录

序言	I
1 基础知识	1
1.1 偏微分方程基本概念	1
1.2 矩阵基本概念	1
1.3 矩阵重要性质与定理	2
1.4 向量和矩阵的范数	3
1.5 常用定理	4
2 有限差分近似基础	5
2.1 离散与差分	5
2.2 任意差分精度	7
3 紧致差分格式	9
3.1 差分近似的推广	9
3.2 各阶导数的紧致格式	10
3.3 交错网格上的紧致格式	10
3.4 联合一阶和二阶导数的紧致格式	10
3.5 单边格式	10
4 差分格式稳定性分析	11
5 抛物型方程	12
5.1 一维热传导方程（常系数扩散方程）	12
5.2 对流扩散方程	13
5.3 二维热传导方程	14

第1章 基础知识

§ 1.1 偏微分方程基本概念

相关概念：

- ① 阶数：未知函数导数的最高阶数
- ② 次数：最高阶导数的幕次
- ③ 线性：对未知函数及其各阶导数是线性（一次）的
- ④ 拟线性：对最高阶导数是线性的
- ⑤ 非线性：略
- ⑥ 自由项：不含有未知函数及其导数的项
- ⑦ 齐次：自由项恒为 0，否则称为非齐次

例如 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^3 = 2xy$ 是二阶、一次（不是三次）、拟线性、齐次 PDE， $\frac{\partial u}{\partial x} + u \frac{\partial u}{\partial y} = x^2$ 是一阶、一次、拟线性、非齐次 PDE。

方程分类：

考虑二元二阶偏微分方程：

$$a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + d \frac{\partial u}{\partial x} + e \frac{\partial u}{\partial y} + f = 0 \quad (1.1)$$

其中 a, b, c, d, e, f 可以是常数，也可以是 x, y, u 及其导数的函数。 a, \dots, f 仅是 x, y 的函数时（包括常数），方程是线性的， a, b, c 是 x, y, u, u'_x, u'_y 的函数时，方程是拟线性的，其它情况都是非线性的。

$$\begin{cases} b^2 - 4ac < 0, & \text{椭圆型方程} \\ b^2 - 4ac = 0, & \text{抛物型方程} \\ b^2 - 4ac > 0, & \text{双曲型方程} \end{cases} \quad (1.2)$$

方程系数取值也范围会影响方程的类型，例如，下面方程在单位圆内是椭圆型，在单位圆外是双曲型：

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + (1 - x^2 - y^2) \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \quad (1.3)$$

方程的特征线：

在方程 1.1 可以

方程组的分类：

定解条件：

§ 1.2 矩阵基本概念

耳熟能详的概念我们不再赘述，这里提一些不熟悉的概念。

对角占优矩阵：

矩阵；若 $a_{ij} = 0 (i \neq j)$ ，则称 A 为对角矩阵；若 $|a_{ii}| \geq \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$ 对任何 i 都成立，则称 A 为对角占优；若 $|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$ 对任何 i 都成立，则称 A 为严格对角占优；

置换矩阵：

置换矩阵 $P = (p_{ij})_{n \times n}$ 是对单位矩阵做行重排（或列重排）而得到的矩阵，这意味着 $p_{ij} \in \{0, 1\}$ 且每行每列有且仅有一个非零值。例如：

$$P_{21} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad P_{32} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad P_{32}P_{21} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (1.4)$$

置换矩阵 P 是一种特殊的正交矩阵 ($PP^T = I$)。

谱、谱半径：

设矩阵 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 的全部特征值为 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ ，则称这些根构成集合为谱，记作 $\lambda(A) = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$ ，并称包含 A 所有特征值的最小圆半径为 A 的谱半径 $\rho(A)$ ：

$$\rho(A) = \max |\lambda_i|, \quad \lambda_i \in \lambda(A) \quad (1.5)$$

规定：

x, \bar{x} 默认为列向量，且基底为标准正交基时， (x_1, \dots, x_n) 与 $\begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$ 等价。

§ 1.3 矩阵重要性质与定理

二阶差分方程通解（数列）：

二阶齐次常系数线性差分方程（可以理解为数列）及其通解为：

$$ax_{j+1} + bx_j + cx_{j-1} = 0 \quad (1.6)$$

$$x_j = C_1\mu_1^j + C_2\mu_2^j, \quad j = 1, 2, \dots, n, \dots \quad (1.7)$$

其中 μ_1, μ_2 是特征方程 $a\mu^2 + b\mu + c = 0$ 的两个根， C_1, C_2 是待定常数（由初始值 x_1, x_2 确定）。

三对角矩阵：

矩阵 A 称为三对角矩阵如果有如下形式：

$$A = \begin{bmatrix} a & b & & \\ c & a & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b \\ & & c & a \end{bmatrix}_{n \times n} \quad (1.8)$$

其特征值为：

$$\lambda_j = a + 2\sqrt{bc} \cdot \cos \frac{j\pi}{n+1}, j = 1, 2, \dots, n \quad (1.9)$$

右特征向量 ($A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$) 构成右特征矩阵 ($AX = \lambda X$) 的列:

$$X = (x_{jk})_{n \times n} = \left[\left(\frac{c}{b} \right)^{\frac{j}{2}} \sin \frac{jk\pi}{n+1} \right]_{n \times n}, \quad j, k = 1, 2, \dots, n \quad (1.10)$$

左特征向量 ($\mathbf{y}^T A = \mathbf{y}^T \lambda$) 构成左特征矩阵 ($YA = Y\lambda$) 的行:

$$Y = X^{-1} = (y_{jk})_{n \times n} = \left[\frac{2}{n+1} \left(\frac{c}{b} \right)^{\frac{j}{2}} \sin \frac{jk\pi}{n+1} \right]_{n \times n}, \quad j, k = 1, 2, \dots, n \quad (1.11)$$

Theorem. 1 (Gerschgorin 圆盘定理):

矩阵 $A = (a_{ij})_{n \times n} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 的特征值都位于复平面上 n 个的并集内:

$$|\lambda - a_{jj}| \leq \sum_{k=1, k \neq j}^n |a_{jk}|, \quad s = 1, 2, \dots, n \quad (1.12)$$

Theorem. 2 (Taussky 定理):

若矩阵 $A \in M(\mathbb{C})_{n \times n}$ 是严格对角占优矩阵, 则 A 非奇异 (满秩)。

§ 1.4 向量和矩阵的范数

向量范数:

向量范数是满足以下三条性质的、从 \mathbb{C}^n 到 $[0, +\infty)$ 的映射:

- ① 正定性: $\|\mathbf{x}\| > 0, \forall 0 \neq \mathbf{x} \in \mathbb{C}^n$
- ② 齐次性: $\|c\mathbf{x}\| = |c| \cdot \|\mathbf{x}\|, \forall c \in \mathbb{C}$
- ③ 三角不等式: $\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|, \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{C}^n$

最常见的是三种 p -范数, 分别称为 1-范数、2-范数、 ∞ -范数:

$$\|\mathbf{x}\|_p = (|x_1|^p + |x_2|^p + \dots + |x_n|^p)^{\frac{1}{p}}, \quad p = 1, 2, \infty, \quad \mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (1.13)$$

特别地, $\|\mathbf{x}\|_\infty = \max_i |x_i|$, 证明如下:

$$\|\mathbf{x}\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}} = \max_i |x_i| \left(\sum_{i=1}^n \frac{|x_i|^p}{(\max_i |x_i|)^p} \right)^{\frac{1}{p}} \quad (1.14)$$

$$1 \leq \left(\sum_{i=1}^n \frac{|x_i|^p}{(\max_i |x_i|)^p} \right)^{\frac{1}{p}} \leq n^{\frac{1}{p}} \implies \|\mathbf{x}\|_\infty = \lim_{p \rightarrow \infty} \|\mathbf{x}\|_p = \max_i |x_i| \quad (1.15)$$

矩阵范数:

矩阵范数是满足以下四条性质的、从 $\mathbb{C}^{m \times n}$ 到 $[0, +\infty)$ 的映射:

- ① 正定性: $\|A\| > 0, \forall 0 \neq A \in \mathbb{C}^{m \times n}$
- ② 齐次性: $\|cA\| = |c| \cdot \|A\|, \forall c \in \mathbb{C}$
- ③ 三角不等式: $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|, \forall A, B \in \mathbb{C}^{m \times n}$
- ④ 相容性: $\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\|, \forall A, B \in \mathbb{C}^{m \times n}$

矩阵 1-范数、2-范数和向量完全相同，但 ∞ -范数无法直接推广（不满足相容性），我们利用矩阵与向量的相容性来定义矩阵诱导 p -范数，

- ① 列和范数： $\|A\|_1 = \max_j \sum_{i=1}^m |a_{ij}|$
- ② 谱范数： $\|A\|_2 = \max \sqrt{\lambda(AA^H)} = \sqrt{\rho(AA^H)}$
- ③ 行和范数： $\|A\|_\infty = \max_i \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$

§ 1.5 常用定理

Theorem. 3 (实系数多项式的根):

实系数二次方程 $x^2 + bx + c = 0$ 的两根按模不大于 1 的充要条件是 $|b| \leq 1 - c \leq 2$

Newton-Cotes 型数值积分公式:

Newton-Cotes 数值积分公式借助 Lagrange 插值来近似计算函数积分，例如 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上的 n 阶 Newton-Cotes 型数值积分（需要 $n + 1$ 个已知结点）:

$$\int_a^b f(x) dx \approx I_n(f) = \sum_{i=0}^n \int_a^b P_i(x) dx \quad (1.16)$$

$$P_i(x) = f(a_i) \cdot \frac{(x - a_0) \cdots (x - a_{i-1})(x - a_{i+1}) \cdots (x - a_n)}{(a_i - a_0) \cdots (a_i - a_{i-1})(a_i - a_{i+1}) \cdots (a_i - a_n)} \quad (1.17)$$

其中 $a_0, a_1, \dots, a_n \in [a, b]$ 为给定的 $n + 1$ 个结点横坐标。

若 f 有 $n + 1$ 阶连续导数，积分误差为:

$$E_n(f) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \int_a^b (x - a_0)(x - a_1) \cdots (x - a_n) dx, \quad \xi \in (a, b) \quad (1.18)$$

特别地，当结点为等距结点 $h = x_i - x_{i-1}$ 时，Newton-Cotes 型数值积分公式可简化为:

$$\int_a^b P_i(x) dx = (-1)^{n+1-i} \frac{h}{(i-1)!(n+1-i)!} \int_0^n x(x-1) \cdots (x-n) dx \quad (1.19)$$

第2章 有限差分近似基础

§2.1 离散与差分

网格及有限差分记号：

最简单的平面网格涉及时间和一维空间（共二维），也即 $[x_0, x_e] \times [t_0, t_e]$ ，空间间隔记为 h_x ，时间间隔记为 h_t ，直线的交点称为结点。离散化后，我们通常将 $u(x, t)$ 简记为 $u(x, t) = u(x_0 + jh_x, t_0 + kh_t) = u_j^k$ ，类似的，多元函数的情况简记为 $u_{j_1, j_2, \dots, j_n}^k$ 。

空间导数近似：

导数的差分近似可由泰勒公式推得：在固定其它变量的情况下，对单一变元使用 Taylor 公式以求得导数的差分表达式。

例如，对函数 u 在 $x + rh_x \in [x_0, x_e]$ 处进行 Taylor 展开（ $r \in \mathbb{Z}$ ）：

$$u_{j+r} = u_j + (rh_x) \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_j + \frac{1}{2} (rh_x)^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_j + \cdots + \frac{1}{n!} (rh_x)^n \left(\frac{\partial^n u}{\partial x^n} \right)_j + \cdots \quad (2.1)$$

在公式 2.1 中令 $r = -1, 1$ 得到：

$$u_{j+1} = u_j + h_x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_j + \frac{1}{2} h_x^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_j + \cdots + \frac{1}{n!} h_x^n \left(\frac{\partial^n u}{\partial x^n} \right)_j + \cdots \quad (2.2)$$

$$u_{j-1} = u_j - h_x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_j + \frac{1}{2} h_x^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_j - \cdots + \frac{(-1)^n}{n!} h_x^n \left(\frac{\partial^n u}{\partial x^n} \right)_j + \cdots \quad (2.3)$$

公式 2.2、公式 2.3、两式相减消去二阶导数，一共得到三种一阶导数差分：

$$\begin{aligned} \text{一阶导数向前差分：} \quad & \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_j = \frac{u_{j+1} - u_j}{h_x} + O(h_x) \\ \text{一阶导数向后差分：} \quad & \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_j = \frac{u_j - u_{j-1}}{h_x} + O(h_x) \\ \text{一阶导数中心差分：} \quad & \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_j = \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2h_x} + O(h_x^2) \end{aligned} \quad (2.4)$$

公式 2.2 和公式 2.3 相加消去一阶导数，得到二阶导数的差分：

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_j = \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h_x^2} + O(h_x^2) \quad (2.5)$$

更高阶空间导数近似：

更高阶的空间导数近似可由待定系数法解线性方程组得到，一般地，由 n 个离散值构造的差分公式（含有 n 个未知系数）的精度不低于 $O(h^{n-1})$ 。

例如考虑 $\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_j$ 的更高阶近似：

$$h_x^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_j = c_1 u_{j-2} + c_2 u_{j-1} + c_3 u_j + c_4 u_{j+1} + c_5 u_{j+2} + h_x^2 O(h_x^4) \quad (2.6)$$

其中 c_1, \dots, c_5 为待定常量。将右端四项在 x 处作泰勒展开，也即在公式 2.1 中令 $r = \pm 1, \pm 2$ ，整理得：

$$\begin{aligned}
 h_x^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_j &= (c_1 + c_2 + c_3 + c_4 + c_5) u_j \\
 &+ \left[\frac{(-2)}{1!} c_1 + \frac{(-1)}{1!} c_2 + \frac{(+1)}{1!} c_4 + \frac{(+2)}{1!} c_5 \right] (h_x) \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_j \\
 &+ \left[\frac{(-2)^2}{2!} c_1 + \frac{(-1)^2}{2!} c_2 + \frac{(+1)^2}{2!} c_4 + \frac{(+2)^2}{2!} c_5 \right] (h_x)^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_j \\
 &+ \left[\frac{(-2)^3}{3!} c_1 + \frac{(-1)^3}{3!} c_2 + \frac{(+1)^3}{3!} c_4 + \frac{(+2)^3}{3!} c_5 \right] (h_x)^3 \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_j \\
 &+ \left[\frac{(-2)^4}{4!} c_1 + \frac{(-1)^4}{4!} c_2 + \frac{(+1)^4}{4!} c_4 + \frac{(+2)^4}{4!} c_5 \right] (h_x)^4 \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right)_j \\
 &+ \left[\frac{(-2)^5}{5!} c_1 + \frac{(-1)^5}{5!} c_2 + \frac{(+1)^5}{5!} c_4 + \frac{(+2)^5}{5!} c_5 \right] (h_x)^5 \left(\frac{\partial^5 u}{\partial x^5} \right)_j \\
 &+ O(h_x^6).
 \end{aligned} \tag{2.7}$$

两端各项系数应相同，因此有方程组：

$$\begin{cases} c_1 + c_2 + c_3 + c_4 + c_5 = 0 \\ -2c_1 - c_2 + c_4 + 2c_5 = 0 \\ 4c_1 + c_2 + c_4 + 4c_5 = 2 \\ -8c_1 - c_2 + c_4 + 8c_5 = 0 \\ 16c_1 + c_2 + c_4 + 16c_5 = 0 \end{cases} \iff \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2 & -1 & 0 & 1 & 2 \\ 4 & 1 & 0 & 1 & 4 \\ -8 & -1 & 0 & 1 & 8 \\ 16 & 1 & 0 & 1 & 16 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ c_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{2.8}$$

$$\implies \begin{bmatrix} c_1 & c_2 & c_3 & c_4 & c_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{12} & \frac{4}{3} & -\frac{5}{2} & \frac{4}{3} & -\frac{1}{12} \end{bmatrix} \tag{2.9}$$

$$\implies \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{-u_{j-2} + 16u_{j-1} - 30u_j + 16u_{j+1} - u_{j+2}}{12h_x^2} + O(h_x^4) \tag{2.10}$$

例如，方程 $\frac{\partial u}{\partial t} = a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 的一个 $O(h_x^4 + h_t)$ 阶精度的差分方程为：

$$u_j^{k+1} = u_j^k + \frac{ah_t}{12h_x^2} (-u_{j-2}^k + 16u_{j-1}^k - 30u_j^k + 16u_{j+1}^k - u_{j+2}^k) \tag{2.11}$$

导数的算子表示：

导数的差分近似可以利用下面的线性算子来表示：

$$\begin{aligned}
 T_x \text{ 移位算子: } & T_x(u_j) = u_{j+1} \\
 \Delta_x \text{ 前差算子: } & \Delta_x(u_j) = u_{j+1} - u_j \\
 \nabla_x \text{ 后差算子: } & \nabla_x(u_j) = u_j - u_{j-1} \\
 \delta_x \text{ 中心差分算子: } & \delta_x(u_j) = u_{j+\frac{1}{2}} - u_{j-\frac{1}{2}} \\
 \delta_x^2 \text{ 中心差分算子方: } & \delta_x^2(u_j) = u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1} \\
 \mu_x \text{ 平均算子: } & \mu_x(u_j) = \frac{1}{2}(u_{j+\frac{1}{2}} + u_{j-\frac{1}{2}}) \\
 D_x \text{ 偏导算子: } & D_x = \frac{\partial}{\partial x}, D_x^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \\
 I \text{ 恒等算子: } & I(u_j) = u_j
 \end{aligned} \tag{2.12}$$

并且这些算子之间也可以相互表达，例如用移位算子 T_x 表达其它算子：

$$\begin{aligned}
 \Delta_x &= T_x - I \\
 \nabla_x &= I - T_x^{-1} \\
 \delta_x &= T_x^{\frac{1}{2}} - T_x^{-\frac{1}{2}} \\
 \delta_x^2 &= T_x - 2I + T_x^{-1} \\
 \mu_x \delta_x &= \frac{1}{2}(T_x - T_x^{-1}) \\
 \mu_x^2 &= \frac{1}{4}(T_x + 2I + T_x^{-1}) \\
 D_x &= \frac{1}{h} \ln T_x \quad \text{或} \quad T_x = e^{hD_x}
 \end{aligned}$$

§ 2.2 任意差分精度

任意阶精度差分格式的建立:

Talor 级数表可以方便我们建立任意阶精度、任意差分格式下的差分公式。以求解下面表达式为例:

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_j - \frac{1}{h_x^2} (au_{j-1} + bu_j + cu_{j+1}) = ? \quad (2.13)$$

作出 Talor 级数表如下, 每一行构成一项的 Talor 展开,

表 2.1: 三点二阶导数近似的 Taylor 级数表

求和项	u_j	$h_x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_j$	$h_x^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_j$	$h_x^3 \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_j$	$h_x^4 \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right)_j$
$h_x^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_j$	0	0	1	0	0
$-au_{j-1}$	$-a$	$-a(-1)^{\frac{1}{1}}$	$-a(-1)^2 \frac{1}{2}$	$-a(-1)^3 \frac{1}{6}$	$-a(-1)^4 \frac{1}{24}$
$-bu_j$	$-b$	0	0	0	0
$-cu_{j+1}$	$-c$	$-c(1)^{\frac{1}{1}}$	$-c(1)^2 \frac{1}{2}$	$-c(1)^3 \frac{1}{6}$	$-c(1)^4 \frac{1}{24}$

从第一列开始, 每一列系数之和为零, 取前三列即得:

$$\begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 \\ 1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -2 \end{bmatrix} \implies (a, b, c) = (1, -2, 1) \quad (2.14)$$

求和不为零的列构成截断误差, 求和后第一个不为零的列称为截断误差首项, 记作 R_j , 在这里即为:

$$R_j = \frac{1}{h_x^2} \left(\frac{-a}{24} + \frac{-c}{24} \right) h_x^4 \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right)_j = -\frac{h_x^2}{12} \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right)_j = O(h_x^2) \quad (2.15)$$

因此此差分公式具有二阶精度。

非均匀网格：

Fourier 误差分析：

知识补充：积分变换（1）：傅里叶级数，积分变换（2）：傅里叶变换

第3章 紧致差分格式

为了减小误差提高计算精度，需要更多的网格点来作高阶导数近似，这导致存储和计算量的激增。本章介绍紧致差分格式，与传统的有限差分格式相比，紧致差分格式可以用较少的结点构造出更高精度的格式。

§3.1 差分近似的推广

差分近似推广：

一般地，函数 $u = u(x)$ ，在结点 j 处 m 阶导数的差分近似可以写成 $p + q + 1$ 个相邻点的形式：

$$\left(\frac{\partial^m u}{\partial x^m}\right)_j - \sum_{k=-p}^q a_k u_{i+k} = R_j \quad (3.1)$$

其中 $\{a_k \mid k = -p, -p+1, \dots, q\}$ 为待定的 $p + q + 1$ 个系数。显然，由上一章的 Talor 级数表和线性方程组可以求得这些系数。事实上，这些系数也可以由插值方法得到，例如 Lagrange 插值和 Hermite 插值。

Lagrange 差分近似：

对函数 $f = f(x)$ ，给定三点 $(x_0, f_0), (x_1, f_1), (x_2, f_2)$ ，则有 Lagrange 插值近似：

$$f(x) \approx L_3(x) = f_0 \frac{(x_1 - x)(x_2 - x)}{(x_1 - x_0)(x_2 - x_0)} + f_1 \frac{(x_0 - x)(x_2 - x)}{(x_0 - x_1)(x_2 - x_1)} + f_2 \frac{(x_0 - x)(x_1 - x)}{(x_0 - x_2)(x_1 - x_2)} \quad (3.2)$$

两边同求一阶导得到：

$$\frac{\partial L_3}{\partial x} = f_0 \frac{2x - (x_1 + x_2)}{2h_x^2} - f_1 \frac{2x - (x_0 + x_2)}{h_x^2} + f_2 \frac{2x_1 - (x_1 + x_0)}{2h_x^2} \quad (3.3)$$

上式中令 $x = x_0, x_1, x_2$ ，可分别得到一阶导数的三点向前差分、三点中心差分 and 三点向后差分。

类似地，对于更高阶导数和更高的精确度，可以取更多真实点以构成高阶 Lagrange 插值多项式。这样导出的差分公式称为 Lagrange 差分近似。

Hermite 差分近似：

Hermite 插值在 Lagrange 插值的基础上，又保证了插值函数与原函数在结点处具有相同的一阶导数。Hermite 插值可以直接从零构造而得，也可在 Lagrange 插值函数 $L_n(x)$ 的基础上构造而得。假设对函数 $f(x)$ 进行拟合，Hermite 插值的一般表达式为（给定 n 个结点）：

$$H_n(x) = \sum_{i=1}^n f_i l_i(x) + \sum_{i=1}^n f'_i h_i(x) \quad (3.4)$$

$$l_i(x) = \prod_{j=1, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} = \frac{(x - x_0) \cdots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \cdots (x - x_n)}{(x_i - x_0) \cdots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \cdots (x_i - x_n)} \quad (3.5)$$

$$h_i(x) = (x - x_i) \cdot l_i(x)^2 = (x - x_i) \prod_{j=1, j \neq i}^n \left(\frac{x - x_j}{x_i - x_j} \right)^2 \quad (3.6)$$

由 Hermite 插值构造差分公式的一般形式为：

$$\sum_{k=-r}^s b_k \left(\frac{\partial^m f}{\partial x^m} \right)_{i+k} - \sum_{k=-p}^q a_k f_{i+k} = R_t \quad (3.7)$$

例如求解一阶导数的三点 Hermite 差分近似，也即求解：

$$d \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{i-1} + \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_i + e \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{i+1} - \frac{1}{h_x} (af_{i-1} + bf_i + cf_{i+1}) = ? \quad (3.8)$$

列出 Talor 级数表，可解得 $(a, b, c, d, e) = (-\frac{3}{4}, 0, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ ，从而得到 $f(x)$ 一阶导数的 4 阶精度的经典 Pade 格式（也称为紧致格式）：

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{i-1} + 4 \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_i + \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{i+1} + \frac{3}{h_x} (f_{j-1} - f_{j+1}) = O(h_x^4) \quad (3.9)$$

§3.2 各阶导数的紧致格式

紧致格式将原函数及其导数结合到一起，这在差分方程中的意义是什么？

§3.3 交错网格上的紧致格式

§3.4 联合一阶和二阶导数的紧致格式

§3.5 单边格式

第 4 章 差分格式稳定性分析

第5章 抛物型方程

§5.1 一维热传导方程（常系数扩散方程）

一维热传导方程：

方程如下：

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad x \in [x_0, x_e], \quad t \in [t_0, t_e] \quad (5.1)$$

其中 $a \in (0, +\infty)$ 为常量，下面推导一些典型的差分格式（对 x 都采取三点中心差分离散）。

向前差分格式：

对 t 采用向前差分格式，即：

$$\frac{u_j^{k+1} - u_j^k}{h_t} = a \frac{u_{j+1}^k - 2u_j^k + u_{j-1}^k}{h_x^2} \quad (5.2)$$

$$\iff u_j^{k+1} = (1 - 2r)u_j^k + r(u_{j+1}^k + u_{j-1}^k) \quad (5.3)$$

其中 $r = \frac{ah_t}{h_x^2}$ ，上式的截断误差 $R = O(h_y + h_x^2)$ ，增长因子为：

$$G(h_t, \sigma) = 1 - 4r \sin^2 \frac{\sigma h}{2} = 1 - 2r(1 - \cos(\sigma h)) \in [1 - 4r, 1] \quad (5.4)$$

其中 $r = \frac{ah_t}{h_x^2}$ ，当 $r \leq \frac{1}{2} \iff h_t \leq \frac{h_x^2}{2a}$ 时 $|G(h_t, \sigma)| \leq 1$ ，即满足 von Neumann 条件，此时差分格式达到稳定。

向后差分格式：

对 t 采用向后差分格式，即：

$$\frac{u_j^k - u_j^{k-1}}{h_t} = a \frac{u_{j+1}^k - 2u_j^k + u_{j-1}^k}{h_x^2} \quad (5.5)$$

其截断误差 $R = O(h_y + h_x^2)$ ，增长因子为：

$$G(h_t, \sigma) = \frac{1}{1 + 4ar \sin^2 \frac{\sigma h}{2}} \in [\frac{1}{1 + 4ar}, 1] \quad (5.6)$$

其中 $r = \frac{h_t}{h_x^2}$ ，恒有 $|G(h_t, \sigma)| \leq 1$ ，因此该格式无条件稳定。

向后加权隐式格式：

将向前差分与向后差分加权组合起来，得到：

$$\frac{u_j^k - u_j^{k-1}}{h_t} = a\theta \frac{u_{j+1}^k - 2u_j^k + u_{j-1}^k}{h_x^2} + a(1 - \theta) \frac{u_{j+1}^{k-1} - 2u_j^{k-1} + u_{j-1}^{k-1}}{h_x^2} \quad (5.7)$$

其中 $\theta \in [0, 1]$ 为权重，其截断误差 $R = a(\frac{1}{2} - \theta)h_t \left[\frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t} \right]_j^k + O(h_t^2 + h_x^2)$ ，因此当 $\theta = \frac{1}{2}$ 时，方程具有 $O(h_t^2 + h_x^2)$ 精度，称为 Crank-Nicolson 格式（CN 格式）。

公式 5.7 的增长因子及稳定性条件为：

$$G(h_t, \sigma) = \frac{1 - 4(1 - \theta)ar \sin^2 \frac{\sigma h}{2}}{1 + 4\theta ar \sin^2 \frac{\sigma h}{2}}, \begin{cases} r \leq \frac{1}{2a(1-2\theta)}, & \theta \in [0, \frac{1}{2}) \\ \text{无条件稳定}, & \theta \in [\frac{1}{2}, 1] \end{cases} \quad (5.8)$$

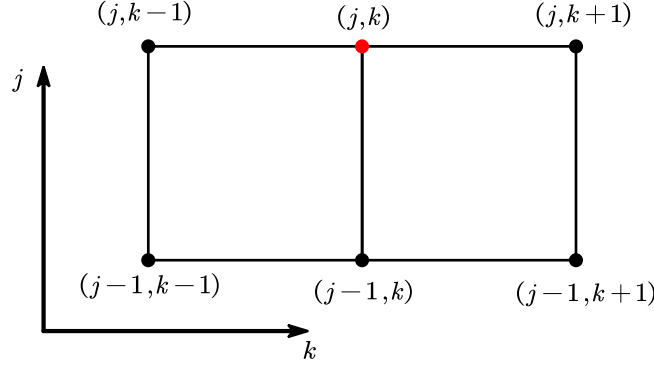


图 5.1: 向后加权隐式差分结点示意图

三层显式格式 (R 格式、DF 格式):

“三层”是指时间项占据三层, 对 t 采用两点中心差分, 对 x 采用三点中心差分, 即得 Richardson 格式, 虽然经典, 却是完全不稳定格式, 如下:

$$\frac{u_j^{k+1} - u_j^{k-1}}{2h_t} - a \frac{u_{j+1}^k - 2u_j^k + u_{j-1}^k}{h_x^2} = 0 \quad (5.9)$$

在 Richardson 格式基础上进行修正, 得到 DuFort-Frankel 格式, 它是无条件稳定的:

$$\frac{u_j^{k+1} - u_j^{k-1}}{2h_t} = a \frac{u_{j+1}^k - (u_j^{k+1} + u_j^{k-1}) + u_{j-1}^k}{h_x^2} \quad (5.10)$$

$$\iff u_j^{k+1} = \frac{1}{2} \left(u_{j+1}^k + u_{j-1}^k + \frac{h_t}{h_x^2} (u_{j+1}^{k-1} - u_{j-1}^{k-1}) \right) \quad (5.11)$$

三层隐式格式:

将 CN 格式的两个时间层推广到三个时间层, 所得隐式格式为:

$$\frac{u_j^{k+1} - u_j^{k-1}}{2h_t} = a \frac{1}{3h^2} (\delta_x^2 u_j^{k+1} + \delta_x^2 u_j^k + \delta_x^2 u_j^{k-1}) \quad (5.12)$$

其截断误差为 $O(h_t^2 + h_x^2)$, 且是无条件稳定格式。

预测—校正格式:

不对称格式:

§ 5.2 对流扩散方程

对流扩散方程:

当对流和扩散都存在时, 如边界层流动, 就要考虑对流扩散方程, 如 Bruges 方程:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (5.13)$$

对流与扩散达到平衡时，有边界条件：

$$u(0, t) = u_0, \quad u(L, t) = 0, \quad \text{也即 } u(x_0, t) = u_0, \quad u(x_e, t) = 0 \quad (5.14)$$

§ 5.3 二维热传导方程

二维热传导方程：

现讨论二维热传导方程的差分格式：

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \quad (x, y) \in \Omega \quad (5.15)$$

向前加权差分格式：

对 t 采用向前差分格式，对 x 和 y 采用（向前）加权中心差分格式，这样可以得到多种显式或隐式格式：

$$\begin{aligned} \frac{u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^k}{h_t} &= \frac{\theta_1}{h^2} (u_{i+1,j}^{k+1} - 2u_{i,j}^{k+1} + u_{i-1,j}^{k+1}) + \frac{1-\theta_1}{h^2} (u_{i+1,j}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i-1,j}^k) \\ &+ \frac{\theta_2}{h^2} (u_{i,j+1}^{k+1} - 2u_{i,j}^{k+1} + u_{i,j-1}^{k+1}) + \frac{1-\theta_2}{h^2} (u_{i,j+1}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i,j-1}^k) \end{aligned} \quad (5.16)$$

也即：

$$\frac{u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^k}{h_t} = \theta_1 \frac{\delta_x^2 u_{i,j}^{k+1}}{h_x^2} + (1-\theta_1) \frac{\delta_x^2 u_{i,j}^k}{h_x^2} + \theta_2 \frac{\delta_y^2 u_{i,j}^{k+1}}{h_y^2} + (1-\theta_2) \frac{\delta_y^2 u_{i,j}^k}{h_y^2} \quad (5.17)$$

例如，令 $\theta_1 = \theta_2 = 0$ ，可得截断精度 $O(h_t + h_x^2 + h_y^2)$ ，稳定性条件为 $h_t \leq \frac{1}{2(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2})}$ 的差分格式。

Saul'yev 不对称格式：

DuFort-Frankel 格式：

一维 DuFort-Frankel 方法可推广到二维，首先写出二维 Richardson 格式（对时间采用两点中心差分，对空间采用三点中心差分），改格式为无条件不稳定格式，然后作替换 $u_{i,j}^k \mapsto \frac{1}{2}(u_{i,j}^{k+1} + u_{i,j}^{k-1})$ ，即得 DuFort-Frankel 格式：

$$\frac{u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^{k-1}}{2h_t} = \frac{u_{i+1,j}^k + u_{i-1,j}^k - u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^{k-1}}{h_x^2} + \frac{u_{i,j+1}^k + u_{i,j-1}^k - u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^{k-1}}{h_y^2} \quad (5.18)$$

$$\iff u_{i,j}^{k+1} = \frac{1}{\frac{1}{2} + \frac{h_t}{h_x^2} + \frac{h_t}{h_y^2}} \left[\frac{h_t}{h_x^2} (u_{i+1,j}^k + u_{i-1,j}^k) + \frac{h_t}{h_y^2} (u_{i,j+1}^k + u_{i,j-1}^k) + \left(\frac{1}{2} - \frac{h_t}{h_x^2} - \frac{h_t}{h_y^2} \right) u_{i,j}^{k-1} \right] \quad (5.19)$$

该式是显式格式，截断误差 $O(h_t^2 + h_x^2 + h_y^2 + \frac{h_x^2}{h_t} + \frac{h_y^2}{h_t})$ ，且无条件稳定。计算时，需要已知两个时间层上的值，其中 $k=0$ 上的值由初始条件给出， $k=1$ 上的值由前面其他公式或 $\frac{1}{2} - \frac{h_t}{h_x^2} - \frac{h_t}{h_y^2} = 0$ （例如 $h_t = \frac{h_x^2}{4} = \frac{h_y^2}{4}$ ）时的公式 5.19 来计算。