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

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[1]

② 次数：最高阶导数的幂次

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，$\dfrac{\partial u}{\partial x}+u\dfrac{\partial u}{\partial y}=x^2$ 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：

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

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。$a,...,f$ 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。

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

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，在单位元外是双曲型：

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

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。

[1]若一个微分方程为 N 阶，则其解中将含有 N 个待定常数。

对角占优矩阵：

矩阵; 若$a_{ij}=0(i\neq j)$, 则称A 为对角矩阵; 若$|a_{ii}|\geqslant\sum_{j=1,j\neq i}^{n}|a_{ij}|$ 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：

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

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 $\lambda_1,\lambda_2,...,\lambda_n$，则称这些根构成集合为谱，记作 $\lambda(A)=\{\lambda_1,\lambda_2,...,\lambda_n\}$，并称包含 A 所有特征值的最小圆半径为 A 的谱半径 $\rho(A)$：

$$\rho(A)=\max|\lambda_i|,\ \lambda_i\in\lambda(A) \tag{1.5}$$

规定：

$\boldsymbol{x},\vec{x}$ 默认为列向量，且基底为标准正交基时，$(x_1,...,x_n)$ 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：

$$ax_{j+1}+bx_j+cx_{j-1}=0 \tag{1.6}$$

$$x_j=C_1\mu_1^j+C_2\mu_2^j,\quad j=1,2,...,n,... \tag{1.7}$$

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：

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

其特征值为：

$$\lambda_j = a + 2\sqrt{bc} \cdot \cos\frac{j\pi}{n+1}, j = 1, 2, ..., n \tag{1.9}$$

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

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

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

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

Theorem. 1（Gerschgorin 圆盘定理）:
矩阵 $A = (a_{ij})_{n\times n} \in C^{n\times n}$ 的特征值都位于复平面上 n 个的并集内：

$$|\lambda - a_{jj}| \leqslant \sum_{k=1, k\neq j}^{n} |a_{jk}|, \quad s = 1, 2, ..., n \tag{1.12}$$

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：$\|\boldsymbol{x}\| > 0, \forall\, 0 \neq \boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n$

② 齐次性：$\|c\boldsymbol{x}\| = |c| \cdot \|\boldsymbol{x}\|, \forall\, c \in \mathbb{C}$

③ 三角不等式：$\|\boldsymbol{x} + y\| \leqslant \|\boldsymbol{x}\| + \|\boldsymbol{y}\|, \forall\, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{C}^n$

最常见的是三种 $p-$ 范数，分别称为 1-范数、2-范数、∞-范数：

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

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

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

$$1 \leqslant \left(\sum_{i=1}^{n} \frac{|x_i|^p}{(\max_i |x_i|)^p}\right)^{\frac{1}{p}} \leqslant n^{\frac{1}{p}} \Longrightarrow ||\boldsymbol{x}||_\infty = \lim_{p\to\infty} ||\boldsymbol{x}||_p = \max_i |x_i| \tag{1.15}$$

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：$\|A + B\| \leqslant \|A\| + \|B\|, \forall\, A, B \in \mathbb{C}^{m\times n}$

④ 相容性：$\|AB\| \leqslant \|A\| \cdot \|B\|, \forall\, A, B \in \mathbb{C}^{m\times n}$

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 $|b| \leqslant 1 - c \leqslant 2$

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）：

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

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

其中 $a_0, a_1, ..., a_n \in [a,b]$ 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：

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

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：

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

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 $u^k_{j_1, j_2, \cdots, j_n}$。

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 Talor 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 Talor 展开（$r \in \mathbb{Z}$）：

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

在公式 2.1 中令 $r = -1, 1$ 得到：

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

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

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：

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

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：

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

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

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

其中 $c_1, ..., c_5$ 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：

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

两端各项系数应相同，因此有方程组：

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

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

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

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：

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

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：

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

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：

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

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：

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

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：

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

其中 $\{a_k \mid k = -p, -p+1, ..., q\}$ 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：

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

两边同求一阶导得到：

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

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、三点中心差分和三点向后差分。

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）：

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

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

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

由 Hermite 插值构造差分公式的一般形式为：

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

例如求解一阶导数的三点 Hermite 差分近似，也即求解：

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

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）：

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

§ 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：

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

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：

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

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

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：

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

其中 $r = \frac{ah_t}{h_x^2}$，当 $r \leqslant \frac{1}{2} \iff h_t \leqslant \frac{h_x^2}{2a}$ 时 $|G(h_t, \sigma)| \leqslant 1$，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：

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

其截断误差 $R = O(h_y + h_x^2)$，增长因子为：

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

其中 $r = \frac{h_t}{h_x^2}$，恒有 $|G(h_t, \sigma)| \leqslant 1$，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：

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

其中 $\theta \in [0, 1]$ 为权重，其截断误差 $R = a\left(\frac{1}{2} - \theta\right)h_t\left[\frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t}\right]_j^k + O(h_t^2 + h_x^2)$，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：

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

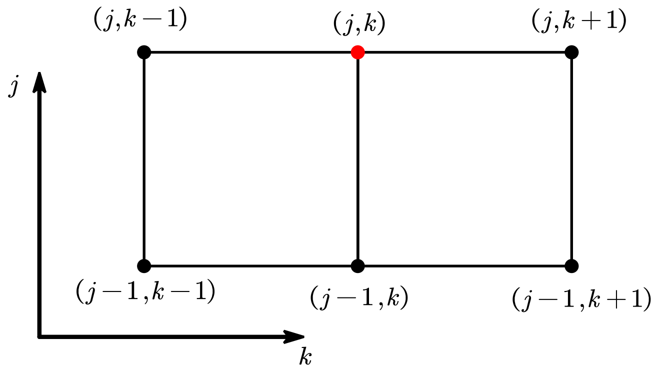

图 5.1: 向后加权隐式差分结点示意图

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：

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

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：

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

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

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：

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

其截断误差为 $O(h_t^2+h_x^2)$，且是无条件稳定格式。

预测一校正格式：

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 Brugres 方程：

$$\frac{\partial u}{\partial t}+u\frac{\partial u}{\partial x}=\nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{5.13}$$

对流与扩散达到平衡时，有边界条件：

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

§ 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：

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

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：

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

也即：

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

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 $h_t\leqslant\frac{1}{2\left(\frac{1}{\Delta x^2}+\frac{1}{\Delta y^2}\right)}$ 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 $u_{i,j}^k\longmapsto\frac{1}{2}(u_{i,j}^{k+1}+u_{i,j}^{k-1})$，即得 DuFort-Frankel 格式：

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

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

该式是显式格式，截断误差 $O(h_t^2+h_x^2+h_y^2+\frac{h_t^2}{h_x^2}+\frac{h_t^2}{h_y^2})$，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。