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 离散化 5

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。

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

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

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：

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

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

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

例如，方程 $\frac{\partial u}{\partial t}=a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 的一个 $O(h_x^4+h_t)$ 阶精度近似为：

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

§ 2.2 差分精度