偏微分方程数值解第二次大作业

陈奕行

November 8, 2019

Contents

1 问题重述

我们需要一个如下一维抛物型方程的 θ 格式，其中 $u \in \mathcal{C}([0,1]\times[0,\infty))$

1.1 Dirichlet 边值条件

$$\begin{cases} u_t - a(x,t)u_{xx} = p(x,t), & 0<x<1,\ t>0, \\ u(x,0) = h(x), & 0\le x\le 1, \\ u|_{x=0} = f(t), & t>0. \\ u|_{x=1} = g(t), & t>0. \end{cases} \tag{1}$$

1.2 混合边值条件

$$\begin{cases} u_t - a(x,t)u_{xx} = p(x,t), & 0<x<1,\ t>0, \\ u(x,0) = h(x), & 0\le x\le 1, \\ [-u_x+\alpha(t)u]|_{x=0} = q(t), & t>0. \\ [u_x+\beta(t)u]|_{x=1} = r(t), & t>0. \end{cases} \tag{2}$$

其中 $a(x,t)\ge a_0>0, \alpha(t)\ge 0, \beta(t)\ge 0$.

2 差分格式及误差分析

2.1 Dirichlet 边值条件

设空间方向步长 $\Delta x = 1/n$, 时间方向步长 Δt。$U_j^m, u_j^m, a_j^m, f_j^m, g_j^m, h_j^m$ 分别为 U, u, a, f, g, h 在 $(j\Delta x, m\Delta t)$ 上的值。记 $f_0^m = f^m, g_n^m = g^m$。θ 差分格式写为

$$\frac{U_j^{m+1}-U_j^m}{\Delta t} = a_j^m((1-\theta)\frac{U_{j+1}^m - 2U_j^m + U_{j-1}^m}{\Delta x^2} + \theta\frac{U_{j+1}^{m+1} - 2U_j^{m+1} + U_{j-1}^{m+1}}{\Delta x^2}) + p_j^m. \tag{3}$$

设 $\mu = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$，则上式可以重写为

$$(2\theta\mu a_j^m+1)U_j^{m+1} - \mu a_j^m\theta(U_{j+1}^{m+1}+U_{j-1}^{m+1})) = (-2(1-\theta)\mu a_j^m+1)U_j^m + \mu a_j^m(1-\theta)(U_{j+1}^m+U_{j-1}^m) + \Delta t p_j^m \tag{4}$$

边值条件将对应的网格点的值取为边上值即可。从而可以写出差分格式 $Au^{m+1} + bd^{m,2} = Bu^m + bd^{m,1} + \Delta t p^m$。其中 $u^m = (u_1^m, u_2^m, ,\dots, u_{n-1}^m)^T, p^m = (p_1^m, p_2^m, ,\dots, p_{n-1}^m)^T, bd^{m,1}, bd^{m,2}$ 为在从第 m 层至 $m+1$ 层的迭代中，两层分别加入的边界项。其形式为 $bd^{m,1} = (\mu a_1^m(1-$

$\theta)f^m,0,\ldots,0,\mu a^m_{m-1}(1-\theta)g^m)^T$，$bd^{m,2}=(-\mu a^m_1\theta f^{m+1},0,\ldots,0,-\mu a^m_{n-1}\theta g^{m+1})^T$。已知 u^0，此后借助数值方法依次解出 u^m 即可。此部分代码为 diffusion_dirichlet.m。

误差分析 使用 Fourier 波形 $U^m_j=\lambda^m_k e^{ik\pi j\Delta x}$，$\theta$ 格式的增长因子

$$\lambda_k=\frac{1-4(1-\theta)\mu a^m_j\sin^2\frac{k\pi\Delta x}{2}}{1+4\theta\mu a^m_j\sin^2\frac{k\pi\Delta x}{2}}$$

因而增长因子与 $a(x,t)$ 有关。设 a 在 $[0,1]\times[0,t_{\max}]$ 上最大值为 a_m。由此可以得到格式 θ 格式 $\mathbb{L}^2$ 稳定性充分必要条件:

$$\begin{cases} 2\mu(1-2\theta)a(x,t)\le 1, & 0\le\theta<1/2,\forall(x,t). \\ \mu<\infty, & 1/2\le\theta\le 1 \end{cases}$$

即

$$\begin{cases} 2\mu(1-2\theta)a_m\le 1, & 0\le\theta<1/2 \\ \mu<\infty, & 1/2\le\theta\le 1 \end{cases} \tag{5}$$

根据公式(5)，满足最大值原理的条件是

$$a(x,t)\frac{\Delta t}{\Delta x^2}(1-\theta)\le\frac{1}{2},\forall(x,t)\in[0,1]\times[0,t_{\max}]$$

即

$$a_m\frac{\Delta t}{\Delta x^2}(1-\theta)\le\frac{1}{2} \tag{6}$$

再来分析其截断误差，为书写简便起见，设 $a=1,p=0$。从而

$$\begin{aligned} T^{m+1/2}_j &= u_t(x_j,t_{m+1/2})-(1-\theta)u_{xx}(x_j,t_m)-\theta u_{xx}(x_j,t_{m+1}) \\ &-[(1-\theta)u_{xxxx}(x_j,t_m)+\theta u_{xxxx}(x_j,t_{m+1})]\frac{(\Delta x)^2}{12}+\mathcal{O}((\Delta t)^2+(\Delta x)^4) \\ &= u_t(x_j,t_{m+1/2})-u_{xx}(x_j,t_{m+1/2})-\frac{(2\theta-1)\Delta t}{2}u_{xxt}(x_j,t_{m+1/2}) \\ &- u_{xxxx}(x_j,t_{m+1/2})\frac{(\Delta x)^2}{12}+\mathcal{O}((\Delta t)^2+(\Delta x)^4+\Delta t(\Delta x)^2) \end{aligned}$$

注意到 $u_t=u_{xx}$，因而当 $\theta=1/2$ 时，$T^{m+1/2}_j=\mathcal{O}((\Delta t)^2+(\Delta x)^2)$；当 $\theta=1/2-1/12\mu$ 时，$T^{m+1/2}_j=\mathcal{O}((\Delta t)^2+(\Delta x)^4+\Delta t(\Delta x)^2)$；余下情况下 Δt 一项无法消去，$T^{m+1/2}_j=\mathcal{O}(\Delta t+(\Delta x)^2)$。利用极大值原理，可以得出收敛速度一般为 $\mathcal{O}(\Delta t+(\Delta x)^2)$。

2.2 混合边值条件：直接差分法

容易知道此时内点的差分格式与 2.1 相同，我们解决考虑边值条件的处理。
利用向前差分算子处理 $x=0$ 的情形，可以得到

$$-\frac{U_1^m - U_0^m}{\Delta x} + \alpha^m U_0^m = q^m \tag{7}$$

在式(4)中令 $j=1$，并将式(7)代入可知

$$(2\theta\mu a_1^m + 1)U_1^{m+1} - \mu a_1^m \theta(U_2^{m+1} + \alpha_0^{m+1}(U_1^{m+1} + q^{m+1}\Delta x)) = \tag{8}$$

$$(-2(1-\theta)\mu a_1^m + 1)U_1^m + \mu a_1^m(1-\theta)(U_2^m + \alpha_0^m(U_1^m + q^m\Delta x)) + \Delta t p_1^m \tag{9}$$

其中 $\alpha_0^m = \frac{1}{1+\alpha^m\Delta x}$。类似地，在 $x=1$ 时，可以得出

$$\frac{U_n^m - U_{n-1}^m}{\Delta x} + \beta^m U_n^m = r^m \tag{10}$$

在式(4)中令 $j=n-1$，并将式(10)代入可知

$$(2\theta\mu a_{n-1}^m + 1)U_{n-1}^{m+1} - \mu a_{n-1}^m \theta(U_{n-2}^{m+1} + \beta_0^{m+1}(U_{n-1}^{m+1} + r^{m+1}\Delta x)) = \tag{11}$$

$$(-2(1-\theta)\mu a_{n-1}^m + 1)U_{n-1}^m + \mu a_{n-1}^m(1-\theta)(U_{n-2}^m + \beta_0^m(U_{n-1}^m + r^m\Delta x)) + \Delta t p_{n-1}^m \tag{12}$$

其中 $\beta_0^m = \frac{1}{1+\beta^m\Delta x}$。从而可以写出差分格式 $A_1 u^{m+1} + bd_1^{m,2} = B_1 u^m + bd_1^{m,1} + \Delta t p^m$。其中，$A_1, B_1, bd_1^{m,1}, bd_1^{m,2}$ 均在上一节对应变量对 $j=1, n-1$ 做出改动。由于 $\alpha_0^m, \beta_0^m \leq 1$，知 A_1 仍然主对角占优。由于将改动具体写出较为复杂，具体改动方式将会在代码中展现。此部分代码为 diffusion_mixed_direct.m

误差分析 由于此此节点差分格式不完全相同，我们不使用 Fourier 分析方法。转而使用最大值原理考虑 $\mathbb{L}^\infty$ 稳定性。首先考虑在 $j=1$ 处截断误差

$$\begin{aligned}T_1^m = [&\frac{u_1^{m+1} - u_1^m}{\Delta t} - (1-\theta)\frac{u_2^m - 2u_1^m + u_0^m}{(\Delta x)^2} - \theta\frac{u_2^{m+1} - 2u_1^{m+1} + u_0^{m+1}}{(\Delta x)^2} - (u_t(x_1,t_m) - u_{xx}(x_1,t_m))] \\ &- (1-\theta)\frac{\alpha_0^m u_1^m + \alpha_0^m q^m \Delta x - u_0^m}{(\Delta x)^2} - \theta\frac{\alpha_0^{m+1} u_1^{m+1} + \alpha_0^{m+1} q^{m+1}\Delta x - u_0^{m+1}}{(\Delta x)^2}\end{aligned} \tag{13}$$

由于 $q^m = -u_x(0,t_m) + \alpha^m u_0^m$，则

$$\frac{\alpha_0^m u_1^m + \alpha_0^m q^m - u_0^m}{(\Delta x)^2} = \frac{\alpha_0^m(u_1^m - u_0^m - (u_x)_0^m \Delta x)}{(\Delta x)^2} = \frac{1}{2}\alpha_0^m (u_{xx})_0^m + \mathcal{O}(\Delta x) \tag{14}$$

于是我们得到

$$T_1^m = \mathcal{O}(\Delta t + (\Delta x)^2) - \mathcal{O}(1) = \mathcal{O}(1) \tag{15}$$

同理在 $j=n-1$ 处仍然为 $\mathcal{O}(1)$ 的截断误差。再来分析此格式是否满足最大值原理，内部节点充分必要条件仍然是式(6)，即 $(1-\theta)\mu a_m \le 1/2$。边界上由于 $\alpha_0^m \le 1$ 可知，当 $(1-\theta)\mu a_1^m \le 1/2$ 即满足最大值原理。由上可知，此时最大值原理充分条件与 Dirichlet 边界条件时相同。于是在同样的条件下，我们可以证明此时收敛速度仍然一般为 $\mathcal{O}(\Delta t^2+(\Delta x)^2)$。但由于边界处收敛速度较慢，我们引入虚拟节点，并引入如下两种改进。

2.3 混合边值条件：虚拟节点法——边界在网格线中间

此时我们需要对网格线做适当平移，使得边界线 $x=0, x=1$ 不落在网格线上，设 $\Delta x = 1/n, x_j = (j-1/2)\Delta x\ (j=0,1,\dots,n+1)$。此时差分方程形式上与(3)相同。我们先考虑 $x=0$ 一侧，可知

$$-\frac{U_1^m - U_0^m}{\Delta x} + \frac{1}{2}\alpha^m (U_1^m + U_0^m) = q^m \tag{16}$$

代入 $j=1$ 得到等效差分方程

$$\begin{aligned}&(2\theta\mu a_1^m + 1)U_1^{m+1} - \mu a_1^m \theta (U_2^{m+1} + \alpha_1^{m+1} U_1^{m+1} + \alpha_2^{m+1} q^{m+1}\Delta x) = \\ &(-2(1-\theta)\mu a_1^m + 1)U_1^m + \mu a_1^m (1-\theta)(U_2^m + \alpha_1^m U_1^m + \alpha_2^m q^m \Delta x) + \Delta t p_1^m\end{aligned} \tag{17}$$

其中 $\alpha_1^m = \frac{2-\alpha^m\Delta x}{2+\alpha^m\Delta x}, \alpha_2^m = \frac{2}{2+\alpha^m\Delta x}$。对 $x=1$，可知

$$\frac{U_{n+1}^m - U_n^m}{\Delta x} + \frac{1}{2}\beta^m (U_{n+1}^m + U_n^m) = r^m \tag{18}$$

代入 $j=n$ 得到等效方程

$$(2\theta\mu a_n^m + 1)U_n^{m+1} - \mu a_n^m \theta (U_{n-1}^{m+1} + \beta_1^{m+1} U_n^{m+1} + \beta_2^{m+1} r^{m+1}\Delta x)) = \tag{19}$$

$$(-2(1-\theta)\mu a_n^m + 1)U_n^m + \mu a_n^m (1-\theta)(U_{n-1}^m + \beta_1^m U_n^m + \beta_2^m r^m \Delta x)) + \Delta t p_n^m \tag{20}$$

其中 $\beta_1^m = \frac{2-\beta^m\Delta x}{2+\beta^m\Delta x}, \beta_2^m = \frac{2}{2+\beta^m\Delta x}$。
从而可以写出差分格式 $Au^{m+1}+bd^{m,2} = Bu^m + bd^{m,1} + \Delta t p^m$。其中 $u^m = (u_1^m, u_2^m, ,\dots, u_n^m)^T, p^m = (p_1^m, p_2^m, ,\dots, p_n^m)^T$, $bd^{m,1}, bd^{m,2}$ 为在从第 m 层至 $m+1$ 层的迭代中，两层分别加入的边界项。特别的，由于 $\alpha_1^m, \alpha_2^m, \beta_1^m, \beta_2^m \le 1$，知此时 A 仍然是主对角占优矩阵。具体形式将会在程序中给出。此部分程序代码见 diffusion_mixed_ghost1.m

误差分析

$$\begin{aligned}T_1^m = [&\frac{u_1^{m+1}-u_1^m}{\Delta t} - (1-\theta)\frac{u_2^m - 2u_1^m + u_0^m}{(\Delta x)^2} - \theta\frac{u_2^{m+1} - 2u_1^{m+1} + u_0^{m+1}}{(\Delta x)^2} - (u_t(x_1,t_m) - u_{xx}(x_1,t_m))] \\ &- (1-\theta)\frac{\alpha_1^m u_1^m + \alpha_2^m q^m - u_0^m}{(\Delta x)^2} - \theta\frac{\alpha_1^{m+1}u_1^{m+1} + \alpha_2^{m+1}q^{m+1} - u_0^{m+1}}{(\Delta x)^2}\end{aligned} \tag{21}$$

由于 $q^m = -u_x(0,t_m) + \alpha^m u(0,t_m), u_1^m = u(0,t_m) + \frac{1}{2}\Delta x u_x(0,t_m) + \frac{1}{8}(\Delta x)^2 u_{xx}(0,t_m) + \mathcal{O}((\Delta x)^3), u_0^m = u(0,t_m) - \frac{1}{2}\Delta x u_x(0,t_m) + \frac{1}{8}(\Delta x)^2 u_{xx}(0,t_m) + \mathcal{O}((\Delta x)^3)$，代入即知

$$\begin{aligned}&\frac{\alpha_1^m u_1^m + \alpha_2^m q^m - u_0^m}{(\Delta x)^2}\\ &= \frac{u(0,t_m)(\alpha_2^m \alpha^m \Delta x + \alpha_1^m - 1) + u_x(0,t_m)(\alpha_1^m/2 - \alpha_2^m + 1/2) + \mathcal{O}((\Delta x)^3)}{(\Delta x)^2} = \mathcal{O}(\Delta x)\end{aligned} \tag{22}$$

于是式(28)可写为

$$T_1^m = \mathcal{O}(\Delta t + (\Delta x)^2)) - \mathcal{O}(\Delta x) = \mathcal{O}(\Delta t + \Delta x) \tag{23}$$

较上一节的结果有较大提升。由于 $\alpha_1^m, \alpha_2^m, \beta_1^m, \beta_2^m \leq 1$ 利用上一节的分析方法，此时满足最大值原理的充分条件仍然为式(6)，此时利用最大值原理，可以得到整体误差为 $\mathcal{O}(\Delta t + (\Delta x)^2)$。

2.4 混合边值条件：虚拟节点法——边界在网格线上

设 $\Delta = 1/n, x_j = j\Delta x (j = -1, 0, 1, \dots, n+1)$。此时 $x_{-1} = -\Delta x$ 为虚拟节点。利用 $j = 0$ 的一阶中心差商 $\frac{\Delta_{0x}}{2\Delta x}$ 代替一阶微分算子，可得

$$-\frac{U_1^m - U_{-1}^m}{2\Delta x} + \alpha^m U_0^m = q^m \tag{24}$$

此时 $j = 0$ 亦为网格内点，需要借助(24)将其差分格式改为

$$\begin{aligned}&(2\theta\mu a_0^m + 1)U_0^{m+1} - \mu a_0^m \theta(2U_1^{m+1} - 2\alpha^{m+1}U_0^{m+1}\Delta x + 2q^{m+1}\Delta x)) =\\ &(-2(1-\theta)\mu a_0^m + 1)U_0^m + \mu a_0^m (1-\theta)(2U_1^m - 2\alpha^m U_0^m \Delta x + 2q^m \Delta x) + \Delta t p_0^m\end{aligned} \tag{25}$$

同理在 $j = n$ 一侧，可知

$$\frac{U_{n+1}^m - U_{n-1}^m}{2\Delta x} + \beta^m U_n^m = r^m \tag{26}$$

$$\begin{aligned}&(2\theta\mu a_n^m + 1)U_n^{m+1} - \mu a_n^m \theta(2U_{n-1}^{m+1} - 2\beta^{m+1}U_n^{m+1}\Delta x + 2r^{m+1}\Delta x)) =\\ &(-2(1-\theta)\mu a_n^m + 1)U_n^m + \mu a_n^m (1-\theta)(2U_{n-1}^m - 2\beta^m U_n^m \Delta x + 2r^m \Delta x) + \Delta t p_n^m\end{aligned} \tag{27}$$

从而可以写出差分格式 $Au^{m+1} + bd^{m,2} = Bu^m + bd^{m,1} + \Delta t p^m$。其中 $u^m = (u_0^m, u_1^m, , \dots, u_n^m)^T, p^m = (p_0^m, p_1^m, \dots, p_n^m)^T$, $bd^{m,1}, bd^{m,2}$ 为在从第 m 层至 $m+1$ 层的迭代中，两层分别加入的边界项。特别的，A 仍然是主对角占优矩阵。具体形式将会在程序中给出。此部分程序代码见 diffusion_mixed_ghost2.m

误差分析 截断误差

$$T_0^m = [\frac{u_1^{m+1}-u_1^m}{\Delta t} - (1-\theta)\frac{u_1^m - 2u_0^m + u_{-1}^m}{(\Delta x)^2} - \theta\frac{u_1^m - 2u_0^m + u_{-1}^m}{(\Delta x)^2} - (u_t(x_0,t_m) - u_{xx}(x_0,t_m))]$$
$$- (1-\theta)\frac{-2\alpha^m \Delta x u_0^m + 2q^m\Delta x + u_1^m - u_{-1}^m}{(\Delta x)^2} - \theta\frac{-2\alpha^{m+1}\Delta x u_0^{m+1} + 2q^{m+1}\Delta x + u_1^{m+1} - u_{-1}^{m+1}}{(\Delta x)^2} \tag{28}$$

由于 $q^m = -u_x(0,t_m) + \alpha^m u_0^m$，代入即知道

$$T_0^m = \mathcal{O}(\Delta t + (\Delta x)^2) - \frac{1-\theta}{3}u_{xxx}(0,t_m)\Delta x - \frac{1-\theta}{3}u_{xxx}(0,t_{m+1})\Delta x + \mathcal{O}((\Delta x)^2) = \mathcal{O}(\Delta t + \Delta x) \tag{29}$$

注意到为使得式(25)U_0^m 系数大于 0 且不小于 U_1^m 系数，此时满足最大值原理的充分必要条件为

$$2(1-\theta)\mu a_0^m(1+\alpha^m\Delta x) \le 1 \tag{30}$$

另一侧类似可知，从而整体满足最大值原理条件为

$$\begin{aligned} 2(1-\theta)\mu a_0^m(1+\alpha^m\Delta x) \le 1 \\ 2(1-\theta)\mu a_0^m(1+\alpha^m\Delta x) \le 1 \end{aligned} \tag{31}$$

在此条件之下，利用最大值原理，可以得到整体误差为 $\mathcal{O}(\Delta t + (\Delta x)^2)$。

3 线性方程数值方法

不难看出，以上问题从 m 层至 $m+1$ 层求解过程转化为线性方程 $Ax = b, A \in \mathbb{R}^{n\times n}, x, b \in \mathbb{R}^{n}$[1]求解。其中 A 为三对角主对角占矩阵，且利用稀疏方式存储。我们采取超松弛迭代求解。设 $A = D - L - U, B = D^{-1}(L+U), g = D^{-1}b$，超松弛迭代法（以 ω 为参数）可以写为

$$x_i^{k+1} = (1-\omega)x_i^k + \omega(\sum_{j=1}^{i-1} b_{ij}x_j^{k+1} + \sum_{j=i+1}^{n} b_{ij}x_j^k + g_i) \tag{32}$$

计算最佳松弛因子 $\rho(B)$ 较为困难，经实验取 $\omega = 1.1$ 收敛较快。此部分代码见 sor.m

[1]这里 n 与上节定义不同。

4 结果展示

我们以下设 $\Delta t = 1/M, u(x,t) = e^{-t}\cos(\pi x) + x$，并根据此函数构建扩散方程及边值条件如下

$$a(x,t) = \frac{x+t+1}{\pi^2} \tag{33}$$
$$p(x,t) = (x+t)e^{-t}\cos(\pi x) \tag{34}$$
$$h(x) = \cos(\pi x) + x \tag{35}$$
$$f(t) = e^{-t} \tag{36}$$
$$g(t) = 1 - e^{-t} \tag{37}$$
$$\alpha(t) = e^{-t} \tag{38}$$
$$q(t) = -1 + e^{-2t} \tag{39}$$
$$\beta(t) = e^{t} \tag{40}$$
$$r(t) = e^{t} \tag{41}$$

如此可以让 $a, p, f, g, \alpha, \beta, q, r$ 和 x, t 均相关。容易验证上述函数满足问题 (1),(2)。这些函数分别在以其名字命名的.m 文件中实现。

4.1 $0 \le \theta < 1/2$

这里对于 Dirichlet 边界条件，我们讨论 L^2 误差，对于混合边值条件，我们讨论 L^∞ 误差，并且使用 2.4 中的差分方法。

Dirichlet 边值条件 由于 $a_m = \frac{3}{\pi^2}$，我们可以取 $\theta = 0.3$，取网格比 $\mu_1 = 0.5, \mu_2 = 2, \mu_3 = 10$，且 $N = 10i, 10 \le i \le 20$。其中 μ_3 不满足稳定性条件。得到结果如 1，其中 err 表示最后一层误差的二范数。[2]

混合边值条件 由于 $a_m = \frac{3}{\pi^2}$，我们可以取 $\theta = 0.3$，取网格比 $\mu_1 = 0.5, \mu_2 = 2, \mu_3 = 10$，且 $N = 10i, 10 \le i \le 20$。其中 μ_3 不满足最大值原理。得到结果如 2，其中 err 表示误差在 $[0,1] \times [0,1]$ 上无穷范数。

[2]其中 $N = 100, \mu_3 = 10$ 时由于初始误差过大共轭梯度法无法正常运行，但初始误差即为 6.7910e+153

Table 1: Dirichlet 边值，$\theta = 0.3$

N	$\|\|err\|\|_2, \mu_1$	$\|\|err\|\|_2, \mu_2$	$\|\|err\|\|_2, \mu_3$
10	0.0017	0.0020	0.0039
20	6.0148e-04	7.0233e-04	2.3661
30	3.2703e-04	3.8205e-04	6.0451e+07
40	2.1232e-04	2.4809e-04	7.6903e+18
50	1.5190e-04	1.7750e-04	3.8515e+33
60	1.1554e-04	1.3502e-04	6.9220e+51
70	9.1682e-05	1.0714e-04	4.2679e+73
80	7.5038e-05	8.7692e-05	8.8084e+98
90	6.2884e-05	7.3489e-05	5.9975e+127
100	5.3690e-05	6.2745e-05	6.7910e+153

Table 2: 混合边值条件，$\theta = 0.3$

N	$\|\|err\|\|_2, \mu_1$	$\|\|err\|\|_2, \mu_2$	$\|\|err\|\|_2, \mu_3$
10	0.0032	0.0036	0.0064
20	7.8829e-04	9.0013e-04	1.9569
30	3.5007e-04	3.9965e-04	7.6956e+07
40	1.9686e-04	2.2472e-04	1.8420e+19
50	1.2597e-04	1.4380e-04	1.9851e+34
60	8.7476e-05	9.9850e-05	8.4807e+52
70	6.4265e-05	7.3355e-05	1.3462e+75
80	4.9202e-05	5.6160e-05	7.6493e+100
90	3.8875e-05	4.4373e-05	1.5201e+130
100	3.1488e-05	3.5941e-05	1.0404e+163

4.2 $\theta \geq 1/2$

Dirichlet 边值条件 由于此时 $\mathbb{L}^2$ 无条件稳定,且最大值原理成立的充分必要条件为 $a_m\mu(1-\theta) \leq \frac{1}{2}$。我们取 $\theta_2 = 0.8$，再取 $\mu = 1, 5, 20, 50$。其中前三组满足最大值原理，余下不满足最大值原理。此时固定 $N = 20, 40, 80, 160$。比较不同网格比时误差的无穷范数，收敛用时，收敛阶。

$\|\|err\|\|_\infty$ \ μ / N	1	5	20	50
20	5.3779e-04	0.0014	0.0046	0.0107
40	1.3588e-04	3.5621e-04	0.0012	0.0028
80	3.3981e-05	8.9172e-05	2.9600e-04	7.0820e-04
160	8.4959e-06	2.2301e-05	7.4093e-05	1.7759e-04
收敛阶	2	2	2	2

Table 3: $\theta \geq 1/2$ 时 Dirichlet 边界数值结果比较——误差

时间/s \ μ / N	1	5	20	50
20	0.258675	0.154355	0.011466	0.042156
40	0.93992	0.249329	0.075908	0.051342
80	4.339699	1.233355	0.418977	0.211609
160	35.625795	7.165042	3.424582	1.468762

Table 4: $\theta \geq 1/2$ 时 Dirichlet 边界数值结果比较——收敛用时

迭代总步数 \ μ / N	1	5	20	50
20	6565	2546	1145	687
40	27155	10615	4984	2946
80	109407	43836	20451	12454
160	441580	176523	83916	50267

Table 5: $\theta \geq 1/2$ 时 Dirichlet 边界数值结果比较——迭代总步数

比较上述结果，不难发现误差仍然遵循关于 N 二阶收敛，但是相较于遵循最大值原理的情形，对于同样的容许误差，不遵循最大值原理的情形所需空间方向网格数目较大。由

于时间方向的网格为 $\mathcal{O}(N^2)$，故需要达到同样的容许误差，不满足最大值原理时的网格比满足最大值原理时格点数显著多。

混合边值条件 我们采取 2.3 中边值处理方法。最大值原理成立的充分必要条件为 $2(1-\theta)\mu a_0^m(1+\alpha^m\Delta x) \leq \frac{1}{2}$。我们取 $\theta_2 = 0.8$，根据前面我们给出的 a, α 相关的值，我们知道 $\mu \leq 10$ 时候必然满足，$\mu \geq 15$ 时必然不满足。于是再取 $\mu = 1, 5, 20, 50$。其中前两组组满足最大值原理，余下不满足最大值原理。此时 $N = 20, 40, 80, 160$。比较不同网格比时误差的无穷范数，收敛用时，收敛阶。不难发现，是否满足最大值原理对收敛阶并无大影响，只是网格比越大，达到同样精度所需空间网格数显著增多，导致减少网格数目的效果不显著。但我们如果放弃让 μ 为一个定值，转而让 M, N 成线性关系。得到结果附在表的最后一列，此时为一阶收敛。我们为使得此时误差能与 $\mu = 1$ 相比，令 $N = 800, M = 8000$，经过 49.189862s 计算之后，得到误差为 2.6945e-05。由于此时空间方向格点远远较固定格点时密集，因而整体误差会更小。
为了比较清晰地展现不满足最大值原理的情形，设 $n = 100, dt = 0.01$。可以得到结果如下。其中 err_1 为第一种虚拟节点，err_2 为第二种虚拟节点，可以看出在 t 较大时，第二种差分方法由于不满足最大值原理而发散。而第一种差分方法仍然具有较好的收敛性。这与我们最大值原理的满足条件预测是一致的。

$\|\|err\|\|_\infty$ \ μ / N	1	5	20	50	$M = 10N$
20	0.0013	0.0034	0.0111	0.0257	0.0018
40	3.1994e-04	8.4828e-04	0.0028	0.0067	7.1627e-04
80	7.9988e-05	2.1228e-04	7.0792e-04	0.0017	3.1149e-04
160	1.9997e-05	5.3083e-05	1.7718e-04	4.2518e-04	1.4409e-04
收敛阶	2	2	2	2	1

Table 6: $\theta \geq 1/2$ 时混合边界数值结果比较——误差、收敛阶

4.3 不同初边值条件处理

对于混合边值条件，我们比较三种不同边值方法（即 2.2,2.3.2.4 节）对数值结果的影响。
我们取 $theta = 0.8, N = 40, \mu = 0.2$, 即 $dt = \frac{1}{8000}$，这样的设计可以保证最大值原理在前若干层成立。下面计算在 $t = 1, 10, 100, 1000$ 限制下不同方法可以计算至第几层，并且我们计算最后一层的 l_∞ 误差。

时间/s \ μ / N	1	5	20	50	$M=10N$
20	0.208959	0.046693	0.016621	0.009110	0.189806
40	0.930312	0.117874	0.053684	0.042900	0.365097
80	5.352800	1.135631	0.241478	0.181548	1.121615
160	46.285523	7.020728	2.258392	1.071055	1.4409e-04

Table 7: $\theta \geq 1/2$ 时混合边界数值结果比较——收敛用时

$t_{\max}$	6	8	10	12	14	16
err_1	0.0011	0.0011	0.0011	0.0011	0.0011	0.0011
err_2	0.0011	0.0017	0.1064	6.2610	318.8845	1.3230e+04

Table 8: 时间方向较大时收敛状况

此时我们需要对 diffusion 若干函数适当改造，使得其能满足时间限制，以及输出最后一层的结果。此时估计误差将会在 main_3.m 中运行。下表中 M 为算至层数，err 为该层的无穷范数。

M, err \ 时间/s / 方法	1	10	100	1000
直接差分法	(3709,0.0224)	(49133,9.7793e-06)	(449091,4.2997e-08)	(3298419,4.2951e-07)
虚拟节点法 1	(4836,3.3337e-04)	(46431,7.1484e-08)	(458998,9.9428e-08)	(3369420,1.2322e-06)
虚拟节点法 2	(3716,2.1634e-04)	(45366,3.3560e-07)	(398581,NaN)	(4531621,NaN)

Table 9: 比较不同差分方法结果

由上表可知，同样时间内算到的层数接近，但误差差距较大。在 $t = 1000s$ 时误差反倒增大可能是由于使用 SOR 数值求解带来的误差。但是值得我们注意的是，其中第二种虚拟节点法迭代步数较多时解发散。其原因是由于层数过大，即 t 过大时不满足(31)，不再满足最大值原理，从而出现解发散。因而，虽然第二种虚拟节点法在前若干层的误差明显小于直接差分法，但在 $a(0,t)$ 关于 m 单增时，无法算到 t 非常大的情形，此时第一种虚拟节点差分方式或直接差分法较为合适。而我们从 4.2 节混合边值条件的比较而看，第二种虚拟节点法对网格比敏感度较低，可以容许较大的网格比。同时，直接差分法虽然在前几层劣势明显，单算至 100000 层左右时与虚拟节点法差距不大。因而，选择差分法应该综合问题条件来考虑。此部分代码见 main_3.m

5 程序使用说明

1. 问题中的若干函数，如 f, g, a 等等，均用相应的.m 文件表示。

2. main.m 通过改若干参数解决前两问，mian_3.m 解决第三问。注意到 main_3.m 以运算时间作为收敛准则，不同电脑运行结果会有一定差异。

3. diffusion_dirichlet 给出 Dirichlet 边值条件处理方法。diffusion_mixed_direct.m, diffusion_mixed_ghost1.m, diffusion_mixed_ghost2.m 分别给出混合边值条件的处理方法,输出为在整个网格上的数值解。diffusion_mixed_ghost11.m 和 diffusion_mixed_ghost21.m 是对对应函数的适应第三问的改进，能够以 $t_{\max}$ 为时间限制，输出迭代终止层数 k 及该层的网格解 u。由于 diffusion_mixed_direct.m 仅在第三问中调用，我们将其直接改为满足此问的形式。

4. err_estimate_dirichlet.m, err_estimate_ghost_1.m, err_estimate_ghost_2.m 分别给出在整个网格上的误差估计。并可以通过修改部分代码选择使用 l_2 范数和 l_∞ 范数。

5. sor.m 利用超松弛方法求解线性方程。