1 问题描述

1.1 区域耦合算法

1.1.1 模型问题

考虑一维偏微分方程组

$$\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial f(\phi)}{\partial x}, \qquad \text{on } \Omega_1; \tag{1a}$$

$$\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial g(\phi)}{\partial x}, \qquad \text{on } \Omega_2, \tag{1b}$$

其中问题域为 $\Omega := \Omega_1 \cup \Omega_2 = [0,1]$ 且 $\Omega_1 \cap \Omega_2 = \{x_I\}$，$x_I \in [0,1]$. ϕ 是守恒的状态变量. 本文考虑抛物方程，即

$$f = -\nu\frac{\partial\phi}{\partial x};\ \ g = -\nu\frac{\partial\phi}{\partial x}, \tag{2}$$

其中扩散系数 $\nu : [0,1] \to \mathbb{R}^+$ 可能在空间上有很大的变化从而导致 f 和 g 之间的巨大差异. 在交界处通量连续

$$f(\phi)\Big|_{x=x_I^-} = g(\phi)\Big|_{x=x_I^+} = -\nu_I\frac{\partial\phi(x_I)}{\partial x}, \tag{3}$$

其中 $\nu_I := \nu(x_I)$ 是在交界处的扩散系数.

在本文中，我们假设 (1a) 是一个较快的过程而 (1b) 描述的是一个较慢的过程，即对 $x \in \Omega_1$，$\nu(x)$ 要大于$x \in \Omega_2$ 的. 对于边界条件，本文中假设左侧边界由 $\phi_0(t)$ 驱动而右侧则满足齐次 Neumann 条件，

$$\phi(t)\Big|_{x=0} = \phi_0(t); \tag{4a}$$

$$g(\phi)\Big|_{x=1} = 0. \tag{4b}$$

1.1.2 主要思想

如图 1 所示，Ω_1 和 Ω_2 分别被离散成 M 和 $N-M$ 个均匀区间$[x_{j-\frac{1}{2}}, x_{j+\frac{1}{2}}]$，$j = 1, \cdots, M, M+1, \cdots, N$，$x_i = hi$，$x_{i\pm\frac{1}{2}} = x_i \pm \frac{1}{2}h$，$h$ 为网格尺度. 未知量 ϕ 位于单元格中心而通量则处于单元格边界处. 特别的，我们有 $x_M \in \Omega_1$、$x_{M+1} \in \Omega_2$ 且交界位置 $x_I = x_M + \frac{1}{2}h$ 总是在两个相邻单元格的边界上.

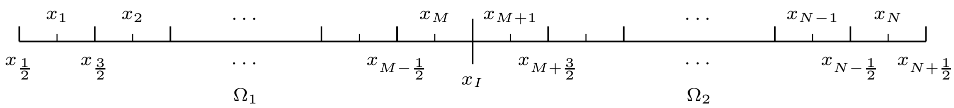

图 1: Ω_1 和 Ω_2 分别被离散成 M 和 $N-M$ 个均匀区间，交界位置为 $x_I = x_M + \frac{1}{2}h$.

通过运用空间中心差分和时间向后欧拉，我们可以得到一个线性系统. 特别的，由条件 (3)，在 x_M 处，我们有

$$\frac{\phi_M^{n+1} - \phi_M^n}{k} = \frac{1}{h}\left\{f_{M-\frac{1}{2}}^{n+1} - \nu_I\frac{\phi_M^{n+1} - \phi_{M+1}^{n+1}}{h}\right\}, \tag{5}$$

其中上标 ^{n} 表示时间 $t_n = nk$，时间步长 $k = O(h)$. 在每个时间步中，我们希望将 (1a) 的解从(1b) 中解耦出来. 即为两个子问题提供在 x_I 处的边界条件从而将其解耦成两个子线性系统. 为此，我们寻找一个近似

$$\phi_{M+1}^{n+1} \approx \phi_{M+1}^{*}\left(\phi_M^{n+1}, \{\phi_j^n\}_{j=1}^N\right), \tag{6}$$

其中，右端项只由 ϕ_M^{n+1} 和已知量组成，将 (6) 代入 (5) 就可以得到第 M 个单元格上的方程

$$\frac{\phi_M^{n+1} - \phi_M^n}{k} = \frac{1}{h}\left\{f_{M-\frac{1}{2}}^{n+1} - \nu_I \frac{\phi_M^{n+1} - \phi_{M+1}^{*}}{h}\right\}. \tag{7}$$

因为我们假设 Ω_2 上是较慢的物理过程，所以可以令 $g_{M+\frac{3}{2}}^{n+1} \approx g_{M+\frac{3}{2}}^{n}$，结合第 $M+1$ 个单元格上的离散格式可以得到 ϕ_{M+1}^{*} 的方程：

$$\frac{\phi_{M+1}^{*} - \phi_{M+1}^n}{k} = \frac{1}{h}\left\{\nu_I \frac{\phi_M^{n+1} - \phi_{M+1}^{*}}{h} - g_{M+\frac{3}{2}}^{n}\right\}. \tag{8}$$

当 $\phi \in \Omega_1$ 已经被推进到 t_{n+1} 时刻，我们设 $\left.\frac{\partial \phi^{n+m}}{\partial n}\right|_{x_I^+} := \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m} \frac{\phi_M^{n+j} - \phi_{M+1}^{j*}}{h}$ 作为 Ω_2 在交界处 x_I 处的 Neumann 边界条件，从而对 Ω_2 上的子问题进行求解。

1.1.3 常系数情况下线性系统

在时间上采用后欧拉法，空间上采用中心差分法，在整个问题域 Ω 上离散 $\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$，其边界条件为 (4)，可以得到如下线性系统

$$(I + rA_c)\Phi^{n+1} = \Phi^n + \mathbf{b}^{\mathrm{BE}}, \tag{9}$$

其中 I 是单位矩阵，

$$r := \frac{k\nu}{h^2}, \tag{10}$$

$$\Phi^n := \left(\phi_1^{n+1}, \phi_2^{n+1}, \ldots, \phi_M^{n+1}, \phi_{M+1}^{n+1}, \ldots, \phi_{N-1}^{n+1}, \phi_N^{n+1}\right)^T, \tag{11}$$

$$\mathbf{b}^{\mathrm{BE}} := (b_1 r \phi_B(t_{n+1}), 0, \ldots, 0)^T, \tag{12}$$

$$A_c := \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & & & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & & \\ & & -1 & 2 & -1 & & & \\ & & & -1 & 2 & -1 & & \\ & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & & & -1 & 1 \end{bmatrix}. \tag{13}$$

上标“BE” 表示向后欧拉方法. A_c 的最后一行由齐次 Neumann 边界条件 (4b) 的线性近似得到：

$$\phi_{N+1} - \phi_N = 0, \tag{14}$$

其中 ϕ_{N+1} 表示靠近右边界右侧单元格的中心值.

(13) 和 (12) 中的系数 a_{11}, a_{12} 和 b_1 取决于左侧 Dirichlet 边界条件的处理方式. 令 ϕ_0 表示靠近左边界左侧单元格的中心值，则由 (4a) 的线性近似

$$\phi_1 + \phi_0 = 2\phi_B \tag{15}$$

可得

$$a_{11} = 3,\ a_{12} = -1,\ b_1 = 2, \tag{16}$$

而由 (4a) 的二次近似

$$\phi_0 = \frac{8}{3}\phi_B - 2\phi_1 + \frac{1}{3}\phi_2 \tag{17}$$

则可得

$$a_{11} = 4,\ a_{12} = -\frac{4}{3},\ b_1 = \frac{8}{3}. \tag{18}$$

由近似 (8) 可知

$$\phi^*_{M+1} = \frac{r}{1+r}\phi^{n+1}_M + \frac{1-r}{1+r}\phi^n_{M+1} + \frac{r}{1+r}\phi^n_{M+2}, \tag{19}$$

再结合 (7) 可得

$$\left(1 + \frac{2r+r^2}{1+r}\right)\phi^{n+1}_M - r\phi^{n+1}_{M-1} = \phi^n_M + \frac{r(1-r)}{1+r}\phi^n_{M+1} + \frac{r^2}{1+r}\phi^n_{M+2}. \tag{20}$$

将 $\frac{\phi^{n+1}_M - \phi^*_{M+1}}{h}$ 作为 Ω_2 的左侧 Neumann 边界条件，则可以得到单元格 $M+1$ 上的方程

$$-\frac{r}{1+r}\phi^{n+1}_M + (1+r)\phi^{n+1}_{M+1} - r\phi^{n+1}_{M+2} = \phi^n_{M+1} - \frac{r(1-r)}{1+r}\phi^n_{M+1} - \frac{r^2}{1+r}\phi^n_{M+2}. \tag{21}$$

因此，常系数情况下本文算法的线性系统为

$$(I + rA)\Phi^{n+1} = (I + rS)\Phi^n + \mathbf{b}^{\mathrm{BE}}. \tag{22}$$

Ω_1 和 Ω_2 上子区域求解器的耦合反映在矩阵 S 和 A 中. 矩阵 S 的绝大多数元素是零，除了

$$s_{ij} = \begin{cases} \frac{1-r}{1+r} & \text{if } i = M, j = M+1; \\ \frac{r}{1+r} & \text{if } i = M, j = M+2; \\ -\frac{1-r}{1+r} & \text{if } i = M+1, j = M+1; \\ -\frac{r}{1+r} & \text{if } i = M+1, j = M+2; \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{23}$$

矩阵 A 是用 (20) 和 (21) 修改 (13) 得到：

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & & & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & & \\ & & -1 & \frac{2+r}{1+r} & 0 & & & \\ & & & -\frac{1}{1+r} & 1 & -1 & & \\ & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & & & -1 & 1 \end{bmatrix}. \tag{24}$$

1.2 稳定性分析

在本小节中，我们主要研究本文算法的稳定性，其可被写成如下形式

$$\Phi^{n+1} = B\Phi^n + \mathbf{b}_L, \tag{25}$$

其中 $B = (I + A)^{-1}(I + S), \mathbf{b}_L = (I + A)^{-1}\mathbf{b}^{\mathrm{BE}}$，$A$、$S$ 与 (24)、(23)一致.

定义 t_n 时刻的误差向量

$$E^n = \Phi^n - \hat{\Phi}^n, \tag{26}$$

其中 $t = t_n$ 时刻网格上的精确解向量 $\phi(x,t)$ 为

$$\hat{\Phi}^n = \left(\phi(x_1, t_n),\ \phi(x_2, t_n),\ \ldots,\ \phi(x_N, t_n)\right)^T. \tag{27}$$

定义第 n 时间步的局部截断误差 τ^n 为

$$\tau^n = \hat{\Phi}^{n+1} - B\hat{\Phi}^n - \mathbf{b}_L. \tag{28}$$

结合(25)、(26)、和 (28) 可得

$$E^{n+1} = BE^n - \tau^n. \tag{29}$$

由归纳法可得

$$E^n = B^n E^0 - \sum_{m=1}^{n} B^{m-1}\tau^{n-m}, \tag{30}$$

其中 B 的上标表示矩阵的幂，其他上标都表示时间步.

显然由 (30) 可知，我们方法的稳定性依赖于矩阵 B 的 *power-bounded* 性质，即

$$\exists C \in \mathbb{R} \text{ s.t. } \forall n \in \mathbb{N},\ \ \|B^n\| < C, \tag{31}$$

本文中范数$\|\cdot\|$ 取 ∞ 范数.

1.2.1 特征值稳定性

本节我们从特征值角度考察稳定性，证明或验证矩阵 B 的谱半径是小于 1 的因为 B 是非奇异的，其特征值的倒数为 B^{-1} 的特征值，我们可以转而考察 B^{-1} 的特征值. 令

$$B^{-1} = (I + S)^{-1}(I + A) = (I + T)(I + A) \tag{32}$$

其中$(I + T) = (I + S)^{-1}$. 易得 T 为

$$(T)_{i,j} = \begin{cases} -\frac{r(1-r)}{1+r^2} & \text{if } i = M, j = M+1; \\ -\frac{r^2}{1+r^2} & \text{if } i = M, j = M+2; \\ \frac{r(1-r)}{1+r^2} & \text{if } i = M+1, j = M+1; \\ \frac{r^2}{1+r^2} & \text{if } i = M+1, j = M+2; \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{33}$$

定义$Q = T + A + TA$, 则我们有 $B^{-1} = I + Q$，

$$
Q = r\begin{bmatrix}
a_{11} & a_{12} & & & & & & & & \\
-1 & 2 & -1 & & & & & & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & & & & & & \\
 & & -1 & 2 & -1 & & & & & \\
 & & & -1 & 1+\frac{1}{1+r^2} & \frac{2r^2-1}{1+r^2} & -\frac{3r^2}{1+r^2} & \frac{r^2}{1+r^2} & & \\
 & & & & -\frac{1}{1+r^2} & \frac{1-2r^2}{1+r^2}+1 & \frac{2r^2-1}{1+r^2} & -\frac{r^2}{1+r^2} & & \\
 & & & & & -1 & 2 & -1 & & \\
 & & & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & & & & & & -1 & 2 & -1 \\
 & & & & & & & & -1 & 1
\end{bmatrix}, \tag{34}
$$

Q 的元素 $q_{i,j}$ 只在 $(i,j) \in [M, M+1] \times [M, M+3], 1 < M < N-2$ 处是不规律的，其他元素与 (24) 中一致，$r = \frac{k\nu}{h^2} = O(\frac{1}{h}) = O(N) > 0$. 当 $h \to 0$，我们希望证明 B 的谱半径

$$
\rho(B)| \leq 1, \tag{35}
$$

即证明所有

$$
\lambda(B^{-1})| = |1 + \lambda(Q)| \geq 1. \tag{36}
$$

目前，我们已经从数值实验角度验证了上述结论，对于 $N = 100, 200, 400, 800, 1600, 3200, 6400, 10000$，$r = \nu N$，$\nu = 0.001, 0.01, 0.1, 1, 10, 50, 100$，$M = 0.1N, 0.2N, \ldots, 0.9N$，$Q$ 的所有特征值实部都是大于 0 的，因此 B 的谱半径 $|\rho(B)| \leq 1$.

2 一些思路

1. 将 Q 分解为 $Q = Q_1 + Q_2$，其中 Q_1 可以为三对角（半）正定矩阵，Q_2 为只在 $(i,j) \in [M, M+3] \times [M, M+3]$ 处有非零元素的矩阵，其特征值可求，例如：

$$
Q_1 = r\begin{bmatrix}
3 & -1 & & & \\
-1 & 2 & -1 & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & -1 & 2 & -1 \\
 & & & -1 & 1
\end{bmatrix}, \;
Q_2 = \begin{bmatrix}
\mathbf{O} & & \\
 & Q_{4\times4} & \\
 & & \mathbf{O}
\end{bmatrix}, \;
Q_{4\times4} = \frac{r^3}{r^2+1}\begin{bmatrix}
-1 & 3 & -3 & 1 \\
1 & -3 & 3 & -1 \\
0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0
\end{bmatrix}, \tag{37}
$$

此时 Q_1 是一个对称三对角正定矩阵，$Q_2 = \frac{r^3}{r^2+1} uv^T$ 是一个秩 1 矩阵，$u = [0, \ldots, 0, -1, 1, 0, 0, \ldots, 0]^T$，$v = [0, \ldots, 0, 1, -3, 3, -1, 0, \ldots, 0]^T$，其非零特征值为 $\lambda_{Q_2} = \frac{-4r^3}{r^2+1}$，对应特征向量为 $[0, \ldots, 0, 1, -1, 0, \ldots, 0]^T$，1 和 -1 所在位置分别为 M 和 $M+1$. 考虑从秩 1 校正矩阵特征值的思路去考察问题.

特别的，

$$
Q_0 = r\begin{bmatrix}
2 & -1 & & & \\
-1 & 2 & -1 & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & -1 & 2 & -1 \\
 & & & -1 & 2
\end{bmatrix} \tag{38}
$$

的特征对是准确可知的，其特征值为 $\lambda_k = 4r\sin^2\left(\frac{k\pi}{2(N+1)}\right)$，对应特征值 $\mathbf{w}_k$ 的第 j 个元素为 $w_{k,j} = \sin\left(\frac{jk\pi}{N+1}\right)$，目前还不确定 Q_1 的特征值是否可显式计算，如果不能，可以将其看作对 Q_0 校正后的结果，从这一层面上考察其特征值.

2. Sherman-Morrison formula：A 是可逆方阵，$1 + v^T A^{-1} u \neq 0$，则

$$(A + uv^T)^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1}uv^T A^{-1}}{1 + v^T A^{-1} u}. \tag{39}$$

该公式也与秩 1 校正息息相关，其给出了秩 1 校正矩阵逆的计算方法. 如此可以得到求 B 的公式，即

$$\begin{aligned} B =& (I+Q)^{-1} = (I + Q_1 + Q_2)^{-1} \\ =& (I + Q_1 + \frac{r^3}{r^2+1} uv^T)^{-1} \\ =& (I+Q_1)^{-1} - \frac{(I+Q_1)^{-1} \frac{r^3}{r^2+1} uv^T (I+Q_1)^{-1}}{1 + \frac{r^3}{r^2+1} v^T (I+Q_1)^{-1} u}. \end{aligned} \tag{40}$$

3. 同样将 Q 分解为 $Q = Q_1 + Q_2$，Q_2 为只在 $(i,j) \in [M, M+3] \times [M, M+3]$ 处有非零元素的矩阵，能否找到一种分解使得 Q_1、Q_2 都是（半）正定矩阵.

4. 因为矩阵的谱半径是所有矩阵范数的下确界，所以，如果能找到一种矩阵范数，使得

$$||B|| \leq 1, \tag{41}$$

即可得证. 然而，目前我们从 ∞-范数角度分析发现并不可行，下表是一些数值结果，可以发现 $||B||_\infty$ 远大于 1.

表 1: 不同 N 取值下的 $||B||_\infty$，$M = N/2$，$r = N$.

N	100	500	1000	5000
$\|\|B\|\|_\infty$	18.04	42.74	61.6	139.43