偏微分方程数值解法

引 论

刘 瑜

March 3, 2017

Outline

为什么研究偏微分方程数值求解

- 数学物理问题大多数由偏微分方程描述
  连续介质力学（流体力学，固体力学），电磁理论，量子力学，$\cdots$
- 实际中遇到的偏微分方程几乎找不到理论解，只能数值求解
- $\cdots$

世界上最快的计算机

Figure: 神威太湖之光

千万核可扩展全球大气动力学全隐式模拟

Figure: 2016 戈登・贝尔奖/中科院，清华大学

大气动力学控制方程

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}\rho_0) = 0,$$
$$\frac{\partial \rho_0 u^l}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\rho_0 u^l) = \rho_0(-\frac{\partial \pi^{'}}{\partial x^l} + g\frac{\Theta^{'}}{\Theta_0}\delta_{l3})$$
$$\frac{\rho_0 \Theta^{'}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\rho_0 \Theta^{'}) = -\rho_0 \mathbf{u} \cdot \nabla \Theta_e$$

其中：ρ 密度，$\mathbf{u}$ 速度，Θ 温度，$\pi = p/p_0$ 归一化压力

Outline

- 偏微分方程基础回顾
  - 基本概念
  - 偏微分方程推导实例
  - 定解问题
  - 方程分类
- 有限差分方法基础
  - 偏导数的差商近似
  - 有限差分算子
  - 误差

偏微分方程的基本概念

偏微分方程的定义：包含变量偏导数的方程

$$F(x_1,\cdots,x_n,u,\frac{\partial u}{\partial x_1},\cdots,\frac{\partial u}{\partial x_n},\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2},\frac{\partial^2 u}{\partial x_1\partial x_2},\cdots,\frac{\partial^n u}{\partial x_1\cdots\partial x_n})=0$$

其中， $u=u(x_1,\cdots,x_n)$.

Notes:

- 如果 x_i 是空间变量，即在特定的空间区域 Ω 求解变量 u，需要在边界 $\partial\Omega$ 上指定边界条件
- 如果 x_i 中有一个变量为时间 t，则还需要指定初始条件，即在 $t=t_0$ 时刻指定 Ω 中每一点的值
- 偏微分方程组指未知变量 $(u_1,\cdots,u_m)$ 大于 1 个，并且至少有一个偏微分方程含有多于 1 个变量

偏微分方程的基本概念

偏微分方程的阶数 指所包含偏导数的最高阶数.
线性 和非线性 方程
定义微分算子 $\mathcal{L}$，偏微分方程可以表示为：

$$\mathcal{L}u = f$$

$f = 0$，称方程是齐次 的，否则称为非齐次 的.
线性 要求 F 对 u 及其导数项都是线性的，即满足
$\mathcal{L}(u+v) = \mathcal{L}(u) + \mathcal{L}(v), \quad \mathcal{L}(cu) = c\mathcal{L}(u)$
非线性方程可以分为：
(1)半线性方程semilinear equations
方程 F 只对 u 是非线性的.
(2)准线性方程quasi-linear equations
方程 F 对 u 的最高阶导数项是线性的.
(3)完全非线性方程fully-nonlinear equations
方程 F 对最高阶导数项是非线性的.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c\frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \Phi(x, y)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + (u + c)\frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + ru(M - u)$$

$$\left[1 + \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^2\right]\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - 2\frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial u}{\partial y}\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + \left[1 + \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2\right]\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$

$$\mathrm{div}\left(\frac{\nabla u}{\sqrt{1 + |\nabla u|^2}}\right) = 0 \quad (x \in \mathbb{R}^2)$$

$$|\nabla u| = c(\mathbf{x})$$

Outline

偏微分方程的推导

例：热传导方程

令 $u(x,y,z,t)$ 表示温度，$H(t)$ 表示所研究区域 Ω 所包含的热量，

$$H(t) = \iiint\limits_{\Omega} c\rho u dxdydz,$$

其中，c 表示物质的比热，ρ 为物质的密度，都假定为常数，且不考虑内部热源. 热量的变化率为 $\frac{dH}{dt} = \iiint\limits_{\Omega} c\rho u_t dxdydz$. 根据能量守恒定律和 *Fourier* 定律,

$$\frac{dH}{dt} = \iint\limits_{\partial\Omega} (\kappa \mathbf{n} \cdot \nabla u) dS,$$

其中 κ 为热传导系数. 由散度定理,

$$\iiint\limits_{\Omega} c\rho u_t dxdydz = \iiint\limits_{\Omega} \nabla \cdot (\kappa \nabla u) dxdydz$$

因此热传导方程的微分形式为

$$c\rho u_t = \nabla \cdot (\kappa \nabla u)$$

对流输运方程

流体以常速度 $\mathbf{c}$ 运动，在这种流体中含有某种污染物，污染物跟随流体运动，其密度由 $u(x,y,z,t)$ 表示，不考虑污染物的扩散. 在固定的区域 Ω 内，污染物的质量为

$$\iiint\limits_{\Omega} u dx dy dz.$$

不考虑源和汇的影响，在 Ω 内污染物质量的变化应由进出该区域的污染物的质量决定，即

$$\frac{\partial}{\partial t}\iiint\limits_{\Omega} u dx dy dz = -\iint\limits_{\partial\Omega} (\mathbf{c}\cdot\mathbf{n}) u dS,$$

其中 $\mathbf{n}$ 为面元外法向. 应用散度定理，最终可得到对流输运方程的微分形式为

$$u_t + \nabla\cdot(\mathbf{c}u) = 0.$$

对于一维问题，方程可以表示为

$$u_t + c u_x = 0.$$

几个典型的偏微分方程

- Laplace 方程

$$\Delta u = 0$$

- Cauchy-Riemann 方程

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial x} & = \frac{\partial v}{\partial y}, \\ \frac{\partial u}{\partial y} & = -\frac{\partial v}{\partial x} \end{cases}$$

给出了复自变量 $z = x + iy$ 的解析函数 $f(z) = u(x, y) + iv(x, y)$.

- Poisson 方程

$$-\Delta u = f(\mathbf{x})$$

一般形式

$$-[\frac{\partial}{\partial x_i} k_i(\mathbf{x}) \frac{\partial u}{\partial x_i}] = F(\mathbf{x})$$

- 扩散方程、传热方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i}(k_i \frac{\partial u}{\partial x_i}) + F(\mathbf{x}, t)$$

其中，$u(\mathbf{x}, t)$ 表示扩散过程中某种物质的浓度或者固体中的温度，$k_i(\mathbf{x})$ 是扩散系数或热传导系数。当 $k_i = a = const.$ 时

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a\Delta u + F(\mathbf{x}, t).$$

- 对流方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + (\mathbf{a} \cdot \nabla) u = F$$

其中 $u = u(\mathbf{x}, t), F = F(\mathbf{x}, t)$, $\mathbf{a}$ 为对流速度

一维情形

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = F$$

- 对流扩散方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + (\mathbf{a} \cdot \nabla) u + k\Delta u = F$$

二维情形

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a_1 \frac{\partial u}{\partial x} + a_2 \frac{\partial u}{\partial y} + k\Delta u = F$$

- 波动方程

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2 \Delta u + F$$

- 重调和方程

$$\Delta^2 u = 0$$

- Schrödinger 方程

$$i\hbar \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m} \Delta u + Vu$$

其中 u 表示波函数，m 为粒子质量，$\hbar = h/2\pi$，V 为势函数.

非线性偏微分方程

- 二维速度势方程

$$(1-c^{-2}\phi_x^2)\phi_{xx}-2c^{-2}\phi_x\phi_y\phi_{xy}+(1-c^{-2}\phi_y^2)\phi_{y^2}=0$$

  其中 $\phi_x=u, \phi_y=v.$

- 三维不可压 Navier-Stokers 方程组

$$\begin{aligned}\frac{\partial u_i}{\partial t}+u_j\frac{\partial u_i}{\partial x_j}&=-\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x_i}+\nu\Delta u_i, i=1,2,3\\ \frac{\partial u_j}{\partial x_j}&=0\end{aligned}$$

  其中，$u=(u_1,u_2,u_3)$ 为速度，p 为压力，ρ 为密度，ν 为粘性系数.

Outline

- 偏微分方程基础回顾
  - 基本概念
  - 偏微分方程推导实例
  - 定解问题
  - 方程分类
- 有限差分方法基础
  - 偏导数的差商近似
  - 有限差分算子
  - 误差

定解问题

在特定条件下对偏微分方程进行求解，这些条件成为定解条件.
给出了方程和定解条件，就构成了一个定解问题.
初始条件: 在初始时刻 t_0 给定物理量的值.

$$u(\mathbf{x}, t_0) = \phi(\mathbf{x}),$$

其中 $\phi(\mathbf{x}) = \phi(x, y, z)$.
对于热传导方程，即给定初始时刻的温度分布.
对于波动方程，需要给定一对初始条件

$$u(\mathbf{x}, t_0) = \phi(\mathbf{x}), \quad and \quad \frac{\partial u}{\partial t}(\mathbf{x}, t_0) = \psi(\mathbf{x}),$$

其中 $\phi(\mathbf{x})$ 为初始位置，$\psi(\mathbf{x})$ 为初始速度.

边界条件

在偏微分方程成立的区域 Ω 的边界 $\partial\Omega$ 上需要满足的条件.

三类最重要的边界条件:

(D) 指定 u 的值 (*Dirichlet* 条件)

(N) 指定法向导数 $\partial u/\partial n$(*Neumann* 条件)

(R) 指定 $\partial u/\partial n + au$(*Robin* 条件)

例：一维热传导问题，$u(x,t)$ 表示温度

如果物体的左边界 $x=0$ 是完全绝热的，右边界浸没在很大的容器中，容器的温度为 $g(t)$，且物体和容器之间的热交换所需的时间可以忽略，则边界条件为

$$\frac{\partial u}{\partial x}=0, \quad u(l,t)=g(t)$$

如果物体与容器间的热交换满足牛顿冷却定律，则右边界条件应为

$$\frac{\partial u}{\partial x}(l,t)=-a[u(l,t)-g(t)],$$

其中 $a>0$. 这是非齐次 *Robin* 条件.

例：边值问题

$$\begin{cases} -\Delta u = f(x), x \in \Omega, \\ u = g(x), x \in \partial\Omega \end{cases}$$

例：一维初边值问题

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + F(x,t), x \in (0.l), t > 0, \\ u|_{x=0} = \varphi_1(t), u|_{x=l} = \varphi_2(t), t > 0, \\ u|_{t=0} = g(x), u_t|_{t=0} = h(x) x \in (0,l), \end{cases}$$

其中 $a > 0$.

偏微分方程的适定性

偏微分方程定解问题的适定性 (well-posedness) 的定义 (Jacques Hadamard,1865-1963)：
如果定解问题的解满足以下准则：
(1) 存在性. 有解存在.
(2) 唯一性. 存在唯一解.
(3) 稳定性. 若方程或定解条件发生小的改变，则解也只会发生小的改变. 则称定解问题是适定的，否则是不适定的 (ill-posed).
例: 定解问题

$$
\begin{aligned}
u_{xy} &= 0, \quad x \in [0,1], y \in [0,1] \\
u(x,0) &= f(x), u(x,1) = g(x) \\
u(0,y) &= m(y), u(1,y) = n(y)
\end{aligned}
$$

如果 $f'(x) \neq g'(x)$，则定解问题是不适定的.

Outline

二阶拟线性方程

$$
a_{ij}\frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} + b_i \frac{\partial u}{\partial x_i} + cu = f,
$$

其中 $u = u(x_1, x_2, \cdots, x_n)$，$a_{ij}, b_i, c$ 和 f 可以是 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 的函数，也可以是 u 和 $\frac{\partial u}{\partial x_i}$ 的函数.
定义矩阵 $\mathbf{A} = [a_{ij}]$.

二阶拟线性方程的分类

假设 $a_{ij}=a_{ji}$，则矩阵 $\mathbf{A}$ 为 $n\times n$ 的对称阵. 如果在点 $(x_1,x_2,\cdots,x_n)$

A 正定或负定 (特征值全同号) $\Longleftrightarrow$ 椭圆型方程

A 的特征值至少有一个为 0 $\Longleftrightarrow$ 抛物型方程

A 的特征值非 0 且有 $n-1$ 个同号 $\Longleftrightarrow$ 双曲型方程

如果在 $\mathbb{R}^n$ 的某个区域 Ω 内，对每点的 $(x_1,x_2,\cdots,x_n)$，偏微分方程都属于同一类型，就称该方程在 Ω 是该类型的。如果方程在 Ω 的不同子区域属于不同类型，方程就称在 Ω 是混合型的.

例：判断方程 $4u_{xx}+u_{yy}+4u_{yz}+4u_{zz}=0$ 的类型

$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}4&0&0\\0&1&2\\0&2&4\end{bmatrix}$，计算特征值为 $\lambda_1=5,\lambda_2=4,\lambda_3=0$，故方程为抛物型.

两个自变量的二阶偏微分方程

设 $u=u(x,y)$，其中 y 可以是时间变量 t，记 $p=(u,\frac{\partial u}{\partial x},\frac{\partial u}{\partial y})$，则二阶拟线性偏微分方程可以写成

$$a(x,y,p)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+2b(x,y,p)\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial y}+c(x,y,p)\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+f(x,y,p)=0$$

如果对于固定的 (x,y,u)，$ac-b^2>0$，方程是椭圆型；
$ac-b^2<0$，方程是双曲型；$ac-b^2=0$，方程是抛物型.
例：*Tricomi* 方程 $u_{xx}+xu_{yy}+u=0$
$ac-b^2=x$. 当 $x>0$ 时，方程为椭圆型；当 $x<0$ 时，方程为双曲型；当 $x=0$ 时，方程为抛物型.

两个自变量的二阶偏微分方程

设 $u = u(x, y)$，其中 y 可以是时间变量 t，记 $p = (u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y})$，则二阶拟线性偏微分方程可以写成

$$a(x, y, p)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2b(x, y, p)\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + c(x, y, p)\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + f(x, y, p) = 0$$

如果对于固定的 (x, y, u)，$ac - b^2 > 0$，方程是椭圆型；
$ac - b^2 < 0$，方程是双曲型；$ac - b^2 = 0$，方程是抛物型.
例：*Tricomi* 方程 $u_{xx} + xu_{yy} + u = 0$
$ac - b^2 = x$. 当 $x > 0$ 时，方程为椭圆型；当 $x < 0$ 时，方程为双曲型；当 $x = 0$ 时，方程为抛物型.

高阶方程转化为一阶方程组

波动方程：

$$u(x,t)_{tt} - \gamma^2 u(x,t)_{xx} = 0$$

$$u(x,t)_{tt} - \gamma^2 u(x,t)_{xx} = (\partial t + \gamma \partial x)(\partial t - \gamma \partial x)u(x,t) = 0$$

其中 $\partial t \equiv \partial/\partial t, \partial x \equiv \partial/\partial x$，令 $(\partial t - \gamma \partial x)u(x,t) = v(x,t)$，从而得到一阶方程组

$$(\partial t - \gamma \partial x)u(x,t) = v(x,t),$$
$$(\partial t + \gamma \partial x)v(x,t) = 0$$

Laplace 方程

$$\partial_{xx}u(x,y)+\partial_{yy}u(x,y)=0$$

令 $\frac{\partial u(x,y)}{\partial x}=v(x,y),\frac{\partial u(x,y)}{\partial y}=w(x,y)$，得到

$$\frac{\partial w(x,y)}{\partial x}=\frac{\partial v(x,y)}{\partial y}$$
$$\frac{\partial v(x,y)}{\partial x}=-\frac{\partial w(x,y)}{\partial y}$$

以上称为 $Cauchy-Riemann$ 方程

对流扩散方程

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + c\frac{\partial u}{\partial x} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

令 $v(x,t) = \frac{\partial u}{\partial x}$，得到

$$\frac{\partial u}{\partial t} + cv = D\frac{\partial v}{\partial x}$$
$$\frac{\partial u}{\partial x} = v$$

一阶线性偏微分方程组的分类

设 $(x,y)\in\Omega\subset\mathbb{R}^2$. 向量函数 $\mathbf{u}=(u_1,u_2,\cdots,u_n)\in\mathbb{R}^n$. 其中 $u_i=u_i(x,y), i=1,2,\cdots,n$. 又已知 $\mathbf{h}(x,y),\mathbf{u}$ 连续，矩阵函数 $\mathbf{A}(x,y,\mathbf{u})\in\mathbb{R}^{n\times n}$，则方程组

$$\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial y}+\mathbf{A}(x,y,\mathbf{u})\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial x}+\mathbf{h}(x,y,\mathbf{u})=0,$$

在某点 $(x,y,\mathbf{u})$ 的类型可由以下方法判定：

当 $\mathbf{A}$ 无实特征值时，椭圆型;

当 $\mathbf{A}$ 所有的特征值都是实的，且有 n 个线性无关的特征向量，则为双曲型；如果还满足不存在相同的实特征值，则方程称为严格双曲型;

当 $\mathbf{A}$ 的特征值为实，但是线性无关的特征向量小于 n 时，方程为抛物型.

波动方程可以表示为一阶线性偏微分方程组

$$\mathbf{u}_t(x,t) + \mathbf{A}\mathbf{u}_x(x,t) = \mathbf{C}\mathbf{u}(x,t)$$

其中

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} -\gamma & 0 \\ 0 & \gamma \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

求特征值

$$|\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A}| = \lambda^2 - \gamma^2 = 0$$

$\lambda = \pm\gamma$，方程为双曲型.

对流扩散方程可以表示为一阶方程组：

$$D\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial t} - cv = 0$$
$$\frac{\partial u}{\partial x} - v = 0$$

即

$$\mathbf{A}\mathbf{u}_x(x,t) + \mathbf{B}\mathbf{u}_t(x,t) = \mathbf{C}\mathbf{u}(x,t)$$

其中

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} v \\ u \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} D & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

将方程乘以 $\mathbf{A}^{-}$，得到

$$\mathbf{u}_x(x,t) + \widehat{\mathbf{A}}\mathbf{u}_t(x,t) = \widehat{\mathbf{C}}\mathbf{u}(x,t)$$

计算 $\widehat{\mathbf{A}}$ 的特征值 $\lambda_{1,2} = 0$，特征向量 $\mathbf{r} = (1,0)^T$，故方程为抛物型.

例：考虑可压缩气体的无旋、无黏、二维定常流动. 如果流场只是在自由来流条件的基础上由一轻微扰动，例如绕小攻角薄物体的流动，当自由来流是亚声速或超声速流动时，控制该流动的方程可以简化为

$$\begin{aligned}(1-M_\infty^2)\frac{\partial u'}{\partial x}+\frac{\partial v'}{\partial y}&=0\\ \frac{\partial u'}{\partial y}-\frac{\partial v'}{\partial x}&=0\end{aligned}$$

其中，u', v' 为气体的扰动速度. 将方程改写为

$$\begin{bmatrix}1-M_\infty^2 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x}+\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial y}=0,$$

其中 $\mathbf{w}=\begin{bmatrix}u'\\ v'\end{bmatrix}$.

进一步的，通过矩阵求逆，方程可以表示为

$$\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} + \mathbf{A}\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial y} = 0$$

其中

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{1-M_\infty^2} \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$$

计算可得 $\mathbf{A}$ 的特征值为

$$\lambda_\pm = \pm\frac{1}{\sqrt{M_\infty^2 - 1}}$$

由此可知，当 $M_\infty < 1$ 时，即来流为亚声速时，方程为椭圆型；当来流为超声速时方程为双曲型.

特征线方法-几何观点

线性对流方程

$$au_x + bu_y = 0$$

上式可以表示为

$$(a, b) \cdot (u_x, u_y) = 0, or \quad (a, b) \cdot \Delta u = 0$$

意味着在方向 (a, b) 上，函数 u 的方向导数为 0. 与 (a, b) 方向平行的曲线为

$$bx - ay = c$$

其中 c 为参数,c 的取值决定了曲线. 在这条曲线上，显然 u 的值将保持不变，故

$$u(x, y) = f(c) = f(bx - ay)$$

代入方程验算.

特征线方法-几何观点

线性对流方程

$$au_x + bu_y = 0$$

上式可以表示为

$$(a, b) \cdot (u_x, u_y) = 0, or \quad (a, b) \cdot \Delta u = 0$$

意味着在方向 (a, b) 上，函数 u 的方向导数为 0. 与 (a, b) 方向平行的曲线为

$$bx - ay = c$$

其中 c 为参数,c 的取值决定了曲线. 在这条曲线上，显然 u 的值将保持不变，故

$$u(x, y) = f(c) = f(bx - ay)$$

代入方程验算.

特征线方法-特征坐标

特征线法的关键在于将偏微分方程变换为常微分方程.
采用坐标变换:

$$\begin{cases} \xi = ax + by \\ \eta = bx - ay \end{cases}$$

在这一坐标系下

$$u_x = u_\xi \xi_x + u_\eta \eta_x = a u_\xi + b u_\eta,$$
$$u_y = u_\xi \xi_y + u_\eta \eta_y = b u_\xi - a u_\eta.$$

从而

$$0 = a u_x + b u_y = a(a u_\xi + b u_\eta) + b(b u_\xi - a u_\eta) = (a^2 + b^2) u_\xi$$

故

$$u_\xi = 0$$

方程的解为

$$u(\xi, \eta) = f(\eta)$$

即 $u(x, y) = f(bx - ay)$.

特征线法-Lagrange 方法

对于 2 个自变量的一阶拟线性方程

$$a(x,y,u)u_x + b(x,y,u)u_y = c(x,y,u)$$

Lagrange 方法大意：

1. 写出特征方程

$$\frac{dx}{a} = \frac{dy}{b} = \frac{du}{c}$$

2. 通过上式，找到函数 $\Phi(x,y,u), \Psi(x,y,u)$，使其满足

$$d\Psi = d\Phi = 0$$

3. 方程的通解为

$$F(\Phi, \Psi) = 0,$$

其中 F 为任意函数.

例：对于线性对流方程，特征方程

$$\frac{dx}{a} = \frac{dy}{b} = \frac{du}{0}$$

显然，可以取 $d\Phi = u$. 由于

$$ady - bdx = d(ay - bx) = 0$$

故取 $\Psi = ay - bx$. 方程的解满足

$$F(ay - bx, u) = 0,$$

F 是任意函数. 因此方程的通解为

$$u = f(bx - ay)$$

例：求解初值问题

$$xu_x + yu_y = u + 1 \quad with \quad u(x, y) = x^2 \quad on \quad y = x^2.$$

解：特征方程为

$$\frac{dx}{x} = \frac{dy}{y} = \frac{du}{u+1}$$

由 $ydx - xdy = 0$，可以得到 $d(x/y) = 0$.
由 $xdu - (u+1)dx$，可以得到 $d(u+1)/x = 0$. 因此

$$F(x/y, (u+1)/x) = 0$$

从而

$$u(x, y) = xf(x/y) - 1$$

根据已知条件

$$x^2 = xf(x/x^2) - 1$$

因此

$$f(x) = x + x^{-1}$$

故方程的解为

$$u(x, y) = x^2/y + y - 1.$$

例：求解 Burges 方程

$$u_t + \frac{1}{2}(u^2)_x = 0 \quad u(x,0) = g(x).$$

解：根据特征方程

$$\frac{dt}{1} = \frac{dx}{u} = \frac{du}{0}$$

显然 $du = 0$，且 $d(x - ut) = 0$. 因此通解为

$$F(u, x - ut) = 0, \quad u = f(x - ut)$$

根据初始条件 $f = g$，因此方程的解为

$$u = g(x - ut)$$

线性二阶偏微分方程的特征线

$$A(x,y)u_{xx} + 2B(x,y)u_{xy} + C(x,y)u_{yy} + D(x,y)u_x$$
$$+E(x,y)u_y + F(x,y)u(x,y) = G(x,y)$$

假设特征线方程 $y = h(x)$，令 $\phi(x,y) = y - h(x)$，则特征方程为：

$$A(x,y)\phi(x,y)_x^2 + 2B(x,y)\phi(x,y)_{xy}^2 + C(x,y)\phi(x,y)_y^2 = 0$$

其中. 假设 $A(x,y) \neq 0$，将上式因式分解

$$A(\phi_x - \omega^+\phi_y)(\phi_x - \omega^-\phi_y) = 0$$

其中

$$\omega^\pm(x,y) = \frac{-B(x,y) \pm \sqrt{B(x,y)^2 - A(x,y)C(x,y)}}{A(x,y)}$$

$\phi_x - \omega^+\phi_y = 0$ 和 $\phi_x + \omega^+\phi_y = 0$ 分别给出了方程的特征线.

$$dy/dx = \omega^\pm$$

例：波动方程 $u_{tt}-c^2u_{xx}=0$ 的特征线. 特征方程为

$$\phi_t^2-c^2\phi_x^2=(\phi_t-c\phi_x)(\phi_t+c\phi_x)=0$$

从而波动方程的特征线为

$$\phi(x,t)=x-ct=const.,\quad \phi(x,t)=x+ct=const.$$

例：扩散方程 $u_t=ku_{xx}$ 的特征线特征方程为

$$k\phi_x^2=0$$

因此 $\phi=\phi(t)=const.$，故特征线为直线 $t=const.$
例：Laplace 方程 $u_{xx}+u_{yy}=0$ 的特征线特征方程为

$$\phi_x^2+\phi_y^2=0$$

显然 $\phi_x=\phi_y=0$.Laplace 方程不存在实特征线.

Notes:
椭圆型方程没有特征线，因此解不能存在间断. 椭圆型方程的解十分光滑.
抛物型方程的特征线 $t = const.$. 对于时间演化问题，不能传播奇性（间断），方程的解是光滑的.
双曲型方程的特征线可以传播奇性 (间断)，对于理论研究和数值计算都十分重要.

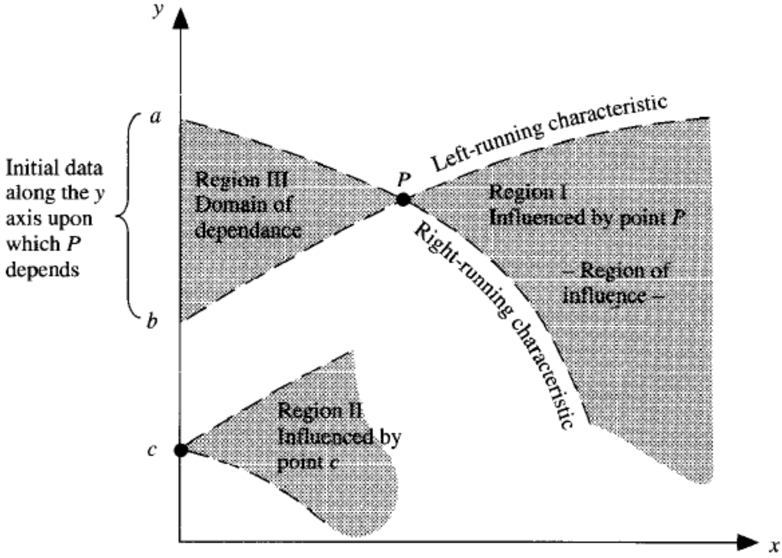


Figure: 二维定常双曲型方程的域和边界

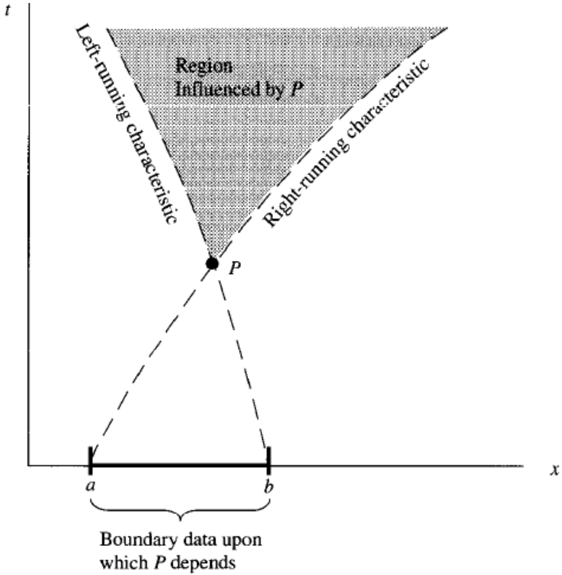


Figure: 一维非定常流动双曲型方程的域和边界

Outline

用差商近似导数，Euler,1768

$$\frac{dx}{dt} = f(x,t), \quad x(0) = a$$

$(\frac{dx}{dt})_n \approx \frac{x^{n+1}-x^n}{\Delta t}$，因此

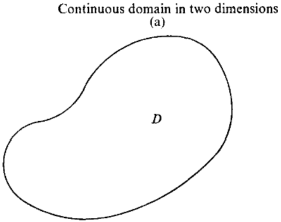
$$\frac{x^{n+1}-x^n}{\Delta t} = f(x_n, tn)$$

可得 $x^{n+1} = x^n + \Delta t f(x_n, tn)$.

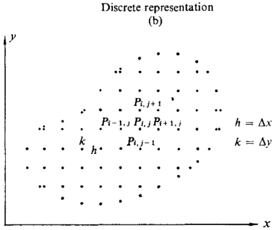
二维边值问题

$$\mathcal{L}u = f, \quad u = u(x, y), \quad (x, y) \in D$$

令 $P_{i,j}$ 表示对定义域 D 的离散化. 如果采用均匀空间离散，即 $h = \Delta x, k = \delta y$. 用 $u_{i,j} = u(ih, jk)$ 表示在离散点 $x = ih, y = jk$ 处解的精确值，而 $U_{i,j}$ 表示在该点的离散近似值.



(a) continuous domain



(b) discrete representation

Figure: 连续二维定义域的离散化

偏导数 $\frac{\partial u}{\partial x}(x,y)$ 的差商近似.

将 $u(x+\Delta x,y)$ 关于 (x,y)Taylor 展开,

$$\begin{aligned} u(x+\Delta x,y) &= u(x,y)+\Delta x\frac{\partial u}{\partial x}(x,y)+\frac{(\Delta x)^2}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,y) \\ &+\frac{(\Delta x)^3}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(x,y)+\frac{(\Delta x)^4}{4!}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x,y)+O[(\Delta x)^4] \end{aligned} \tag{1}$$

除以 Δx, 整理后得到

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x,y)=\frac{u(x+\Delta x,y)-u(x,y)}{\Delta x}+O(\Delta x)$$

上式称为前向差分, 若用用下标记号表示

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{i,j}=\frac{u_{i+1,j}-u_{i,j}}{h}+O(h)$$

同样可以得到

$$\left.\frac{\partial u}{\partial y}\right|_{i,j}=\frac{u_{i,j+1}-u_{i,j}}{h}+O(h)$$

$O(h),O(k)$ 表示差商近似截断误差.

将 $u(x-\Delta x, y)$ 关于 (x, y)Taylor 级数展开

$$u(x-\Delta x, y) = u(x, y) - \Delta x \frac{\partial u}{\partial x}(x, y) + \frac{(\Delta x)^2}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, y) - \frac{(\Delta x)^3}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(x, y) + \frac{(\Delta x)^4}{4!}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x, y) + O[(\Delta x)^4] \quad (2)$$

可以得到后向差分近似

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{i,j} = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{h} + O(h)$$

同样可以得到

$$\left.\frac{\partial u}{\partial y}\right|_{i,j} = \frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{h} + O(h)$$

由 (1)-(2) 得到

$$u(x+\Delta x, y) - u(x-\Delta x, y) = 2\Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^3}{3} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + O[(\Delta x)^5]$$

二阶中心差分

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2h} + O(h^2)$$

同样可得:

$$\left.\frac{\partial u}{\partial y}\right|_{i,j} = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2k} + O(k^2)$$

由 (1)+(2) 得到

$$u(x+\Delta x, y) - 2u(x, y) + u(x-\Delta x, y) = (\Delta x)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, y) + \frac{(\Delta x)^4}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + O[(\Delta x)^6]$$

$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, y)$ 的二阶中心差分

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - 2u(i,j) + u_{i-1,j}}{h^2} + O(h^2)$$

同样可得：

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right|_{i,j} = \frac{u_{i,j+1} - 2u(i,j) + u_{i,j-1}}{k^2} + O(k^2)$$

当 $h = k$ 时，对 Laplace 算子 $\nabla^2 u = u_{xx} + u_{yy}$ 的差分离散可以表示为

$$\nabla^2 u\big|_{i,j} = u_{xx}\big|_{i,j} + u_{yy}\big|_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{i,j}}{h_2} + O(h^2)$$

交叉偏导数 $\partial^2 u/\partial x\partial y$.

$u(x+\Delta x, y+\Delta y)$ 关于 (x, y) 进行二维 Taylor 级数展开

$$
\begin{aligned}
u(x+\Delta x, y+\Delta y) = u(x, y) + \Delta x\frac{\partial u}{\partial x}(x, y) + \Delta y\frac{\partial u}{\partial y}(x, y) \\
+\frac{\Delta x^2}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, y) + \frac{\Delta y^2}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x, y) \\
+\Delta x\Delta y\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial y}(x, y) + O(h^3, k^3, h^2 k, hk^2)
\end{aligned}
$$

$u(x-\Delta x, y-\Delta y)$ 关于 (x, y) 进行二维 Taylor 级数展开

$$
\begin{aligned}
u(x+\Delta x, y+\Delta y) = u(x, y) - \Delta x\frac{\partial u}{\partial x}(x, y) - \Delta y\frac{\partial u}{\partial y}(x, y) \\
+\frac{\Delta x^2}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, y) + \frac{\Delta y^2}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x, y) \\
+\Delta x\Delta y\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial y}(x, y) + O(h^3, k^3, h^2 k, hk^2)
\end{aligned}
$$

$u(x+\Delta x, y-\Delta y)$ 关于 (x, y) 进行二维 Taylor 级数展开

$$\begin{aligned} u(x+\Delta x, y+\Delta y) = u(x, y) &+ \Delta x\frac{\partial u}{\partial x}(x, y) - \Delta y\frac{\partial u}{\partial y}(x, y) \\ &+ \frac{\Delta x^2}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, y) + \frac{\Delta y^2}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x, y) \\ &- \Delta x\Delta y\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}(x, y) + O(h^3, k^3, h^2 k, hk^2) \end{aligned}$$

$u(x-\Delta x, y+\Delta y)$ 关于 (x, y) 进行二维 Taylor 级数展开

$$\begin{aligned} u(x+\Delta x, y+\Delta y) = u(x, y) &- \Delta x\frac{\partial u}{\partial x}(x, y) + \Delta y\frac{\partial u}{\partial y}(x, y) \\ &+ \frac{\Delta x^2}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, y) + \frac{\Delta y^2}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x, y) \\ &- \Delta x\Delta y\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}(x, y) + O(h^3, k^3, h^2 k, hk^2) \end{aligned}$$

将以上 4 式相加，得到

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} = \frac{u_{i+1,j+1} - u_{i+1,j-1} - u(i-1,j+1) - u_{i-1,j-1}}{4hk} + O(h^3/k, k^3/h, \cdots)$$

若 $h = k$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} = \frac{u_{i+1,j+1} - u_{i+1,j-1} - u(i-1,j+1) - u_{i-1,j-1}}{4h^2} + O(h^2)$$

Outline

考虑单变量函数 $y=f(x)$. 在 x 轴上进行离散，取等间距 $h=x_{n+1}-x_n$，并记 $y_n=f(x_n)$. 定义如下算子

前向差分：$\Delta y_n=y_{n+1}-y_n$

后向差分：$\nabla y_n=y_n-y_{n-1}$

中心差分：$\delta y_n=y_{n+1/2}-y_{n-1/2}$

平均算子：$\mu y_n=\frac{1}{2}[y_{n+1/2}+y_{n-1/2}]$

位移算子：$Ey_n=y_{n+1}$

积分算子：$Jy=\int_x^{x+h}y(t)dt$

微分算子：$Dy=dy/dx$

对差分算子进行操作，可以得到算子间的关系

$$\Delta=E-1,\quad DJ=JD=\Delta,\quad \nabla=1-E^{-1}$$
$$\mu=\frac{1}{2}(E^{1/2}+E^{-1/2}),\quad \delta=E^{1/2}-E^{-1/2},$$

$$\begin{aligned}\mu^2=1+\frac{1}{4}\delta^2,\quad 1=\mu\mu^{-1}&=\mu(1+\frac{1}{4}\delta^2)^{-1/2}\\&=\mu(1-\frac{1}{8}\delta^2+\frac{3}{128}\delta^4+\cdots)\end{aligned}$$

下面考虑微分算子 D 和其他算子之间的关系. $f(x+h)$ 在 x 处的 Taylor 展开

$$f(x+h) = f(x) + \frac{h}{1!}f'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \cdots$$

上式表示成算子形式

$$Ef(x) = \left[1 + \frac{hD}{1!} + \frac{h^2D^2}{2!} + \cdots\right] f(x) = e^{hD}f(x).$$

因此算子 E 和 D 之间的关系为

$$E = e^{hD}$$

上式的意义是对于任意的 N 阶多项式 $(\forall N \in \mathcal{N})$, 算子 E 和 $\sum_{n=0}^{N}(h^nD^n/n!)$ 得到相同的结果.

根据差分算子之间的关系式，可以得到

$$
\begin{aligned}
hD = \log[E] &= \log(1+\Delta) = -\log(1-\nabla) \\
&= 2\sinh^{-1}\delta/2 = 2\log\left[(1+\frac{1}{4}\delta^2)^{1/2} + \frac{1}{2}\delta\right]
\end{aligned}
$$

由上式，展开 $\log(1+\Delta)$，

$$
\left.\frac{dy}{dx}\right|_i = Dy_i = \frac{1}{h}\left[\Delta - \frac{1}{2}\Delta^2 + \frac{1}{3}\Delta^3 - \cdots\right] y_i.
$$

对于高阶导数

$$
\begin{aligned}
\left.\frac{d^k y}{dx^k}\right|_i &= D^k y_i = \frac{1}{h^k}\left[\log(1+\Delta)\right]^k \\
&= \frac{1}{h^k}\left[\Delta^k - \frac{k}{2}\Delta^{k+1} + \frac{k(3k+5)}{24}\Delta^{k+2}\right. \\
&\qquad \left. - \frac{k(k+2)(k+3)}{48}\Delta^{k+3} + \cdots\right] y_i.
\end{aligned}
$$

对于二阶导数

$$
\begin{aligned}
h^2 y'' &= \left[\Delta^2 - \Delta^3 + \frac{11}{12}\Delta^4 - \frac{5}{6}\Delta^5 + \cdots\right] y_i \\
&= (y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}) \\
&- (y_{i+2} - 3y_{i+1} + 3y_i - y_{i-1}) + \frac{11}{12}\Delta^4 y_i + \cdots
\end{aligned}
$$

根据 $E = 1 + \Delta$

$$
\begin{aligned}
E^p y_i = y(x_i + ph) = (1+\Delta)^p y_i &= \left(\sum_{j=0}^{p} \binom{p}{j} \Delta^j\right) y_i \\
&= y_i + p(\Delta y_i) + \binom{p}{2}\Delta^2 y_i + \cdots
\end{aligned}
$$

其中 $\binom{p}{j} = \frac{p!}{j!(p-j)!}$.

由 $y_i = Ey_{i-1}$，

$$\left.\frac{dy}{dx}\right|_i = \frac{1}{h}\left[\log(1+\Delta)\right] y_i = \frac{1}{h}\left[\log(1+\Delta)\right](1+\Delta) y_{i-1}$$
$$= \frac{1}{h}\left[\Delta + \frac{1}{2}\Delta^2 - \frac{1}{6}\Delta^3 + \cdots\right] y_{i-1}$$

相应的，对于二阶导数

$$h^2 y_i'' = \left[\Delta^2 - \frac{1}{12}\Delta^4 + \frac{1}{12}\Delta^5 - \cdots\right] y_{i-1}.$$

应用后向差分算子

$$\left.\frac{d^k y}{dx^k}\right|_i = D^k y_i = \frac{(-1)^k}{h^k}\left[\log(1-\nabla)\right]^k y_i$$
$$= \frac{1}{h^k}\left[\nabla^k + \frac{k}{2}\nabla^{k+1} + \frac{k(3k+5)}{24}\nabla^{k+2}\right.$$
$$\left. + \frac{k(k+2)(k+3)}{48}\nabla^{k+3} + \cdots\right] y_i.$$

$$\left.\frac{dy}{dx}\right|_i = Dy_i = \frac{1}{h}\left[\nabla + \frac{1}{2}\nabla^2 + \frac{1}{3}\nabla^3 + \cdots\right] y_i.$$

$$h^2 y'' = \left[\nabla^2 + \nabla^3 + \frac{11}{12}\nabla^4 + \frac{5}{6}\nabla^5 + \cdots\right] y_i$$
$$= (y_i - 2y_{i-1} + y_{i-2})$$
$$+ (y_{i+1} - 3y_i + 3y_{i-1} - y_{i-2}) + \frac{11}{12}\nabla^4 y_i + \cdots$$

$$
\begin{aligned}
\left.\frac{dy}{dx}\right|_i &= \left[\frac{2}{h}\sinh^{-1}\frac{\delta}{2}\right] y_i \\
&= \frac{1}{h}\left(\delta - \frac{1}{24}\delta^3 + \frac{3}{640}\delta^5 - \frac{5}{7168}\delta^7 + \cdots\right) y_i
\end{aligned}
$$

或者

$$
\begin{aligned}
\left.\frac{dy}{dx}\right|_i &= \frac{\mu}{\sqrt{1+\delta^2/4}}\left[\frac{2}{h}\sinh^{-1}\frac{\delta}{2}\right] y_i \\
&= \frac{\mu}{h}\left(\delta - \frac{1^2}{3!}\delta^3 + \frac{1^2\cdot 2^2}{5!}\delta^5 - \frac{1^2\cdot 2^2\cdot 3^2}{7!}\delta^7 + \cdots\right) y_i
\end{aligned}
$$

偶数阶导数

$$
\begin{aligned}
D^{2n} &= \left[\frac{2}{h}\sinh^{-1}\frac{\delta}{2}\right]^{2n} \\
&= \frac{1}{h^{2n}}\left(\delta^{2n} - \frac{n}{12}\delta^{2n+2} + \frac{n(11+5n)}{1440}\delta^{2n+4} - \cdots\right)
\end{aligned}
$$

因此

$$
\left.\frac{d^2y}{dx^2}\right|_i = \frac{1}{h^2}\left(\delta^2 - \frac{1}{12}\delta^4 + \frac{1}{90}\delta^6 - \cdots\right) y_i
$$

半节点处的导数

$$
\left.\frac{d^{2n}y}{dx^{2n}}\right|_{i+1/2} = \frac{\mu}{\sqrt{1+\delta^2/4}}\left[\frac{2}{h}\sinh^{-1}\frac{\delta}{2}\right]^{2n} y_{i+1/2}
$$

$$
\left.\frac{d^{2n+1}y}{dx^{2n+1}}\right|_{i+1/2} = \left[\frac{2}{h}\sinh^{-1}\frac{\delta}{2}\right]^{2n+1} y_{i+1/2}
$$

因此

$$
\left.\frac{dy}{dx}\right|_{i+1/2} = \frac{1}{h}\left(\delta - \frac{1}{24}\delta^3 + \frac{3}{640}\delta^5 - \frac{5}{7168}\delta^7 + \cdots\right) y_{i+1/2}
$$

$$
\left.\frac{d^2y}{dx^2}\right|_{i+1/2} = \frac{\mu}{h^2}\left(\delta^2 - \frac{5}{24}\delta^4 + \frac{259}{5760}\delta^6 - \frac{3229}{322560}\delta^8 + \cdots\right) y_{i+1/2}
$$

Outline

考虑定解问题

$$
\begin{aligned}
u_{xx} + u_{yy} = 0, \quad (0 \le x \le 1, 0 \le y \le 1) \\
u(0, y) = f(y), u(x, 0) = g(x) \\
u_x(1, y) = a(y), u_y(x, 1) = b(x)
\end{aligned}
$$

采用均匀矩形单元离散定义域.$P_{i,j} = (ih, jk)$，其中 $h = \Delta x = 1/N, k = \Delta y = 1/M$. 用五点差分近似二阶导数，整理后得到有限差分方程

$$
\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{k^2}) = O(h^2) + O(k^2).
$$

以上有限差分方程中出现的误差项 $O(h^2)+O(k^2)$ 称为截断误差.
如果边界条件不是 *Dirichlet* 类型，则边界条件的离散也会引入误差.

$$\frac{u_{N,j}-u_{N-1,j}}{h}=a(jk)+O(h)$$

$O(h)$ 称为边界截断误差.
将连续问题用离散模型替代产生的误差称为离散误差. 整个离散误差的阶数，由所有近似的最小误差阶数决定.
当离散方程没有精确求解，引入的误差称为舍入误差.
Taylor 级数展开可以较容易确定差分格式的精度.
差分算子，估计渐近误差阶 $\Delta^k u=h^kD^ku(\xi)$

$$\left.\frac{d^2y}{dx^2}\right|_i=\frac{1}{h^2}\left(\delta^2-\frac{1}{12}\delta^4+\frac{1}{90}\delta^6-\cdots\right)y_i$$

如果忽略 6 阶以上差分项，则 y'' 的误差阶为 $O(h^4)$.

讲义和作业下载

讲义和作业托管在 github.

- GNU/Linux 系统
  git clone https://github.com/xialiuyu/foamer.git
- Windows 系统
  输入网址 https://github.com/xialiuyu/foamer.git
  点击 clone or download，然后选择 Download ZIP