

计算物理B

第四章 有限差分方法

主讲：张志勇

zzyzhang@ustc.edu.cn

有限差分法

数值求解常微分方程或偏微分方程的方法

物理学和其他学科领域的许多问题在被分析研究之后, 往往可以归结为常微分方程或偏微分方程的求解问题。

处理一个特定的物理问题, 除了需要知道它满足的数学方程外, 还应当同时知道这个问题的定解条件, 然后才能设计出行之有效的计算方法来求解。

连续→离散

有限差分法以变量离散取值后对应的函数值来近似微分方程中独立变量的连续取值

放弃了微分方程中独立变量可以取连续值的特征，而关注独立变量离散取值后对应的函数值。

原则上说，这种方法仍然可以**达到任意满意的计算精度**。因为方程的连续数值解可以通过减小独立变量离散取值的间格，或者通过离散点上的函数值插值计算来近似得到。

随着计算机的诞生和应用而发展起来。其计算格式和程序的设计都比较直观和简单，因而，它的实际应用已经构成了计算数学和计算物理的重要组成部分。

有限差分法的具体操作

1. 用差分代替微分方程中的微分，将连续变化的变量离散化，得到差分方程组的数学形式

通过网络分割法，将函数定义域分成大量相邻而不重合的子区域。

通常采用的是规则的分割方式，这样可以便于计算机自动实现和减少计算的复杂性。

网络线划分的交点称为节点。若与某个节点P相邻的节点都是定义在场域内的节点，则P点称为正则节点；反之，若节点P有处在定义域外的相邻节点，则P点称为非正则节点。

2. 求解差分方程组

在第二步中，数值求解的关键就是要应用适当的计算方法，求特定问题在所有这些节点上的离散近似值。

有限差分法的差分格式

一个函数在 x 点上的一阶和二阶微商，可以近似地用它所临近的两点上的函数值的差分来表示。

如对一个单变量函数 $f(x)$ ， x 为定义在区间 $[a,b]$ 的连续变量。以步长 $h=\Delta x$ 将 $[a,b]$ 区间离散化，我们得到一系列节点 $x_1=a$ ， $x_2=x_1+h$ ， $x_3=x_2+h=a+2\Delta x$ ， \dots ， $x_{n+1}=x_n+h=b$ ，然后求出 $f(x)$ 在这些点上的近似值。

显然步长 h 越小，近似解的精度就越好。与节点 x_i 相邻的节点有 x_i-h 和 x_i+h ，因此在 x_i 点可以构造如下形式的差值：

$$f(x_i + h) - f(x_i),$$

节点 x_i 的一阶向前差分

$$f(x_i) - f(x_i - h),$$

节点 x_i 的一阶向后差分

$$f(x_i + h) - f(x_i - h).$$

节点 x_i 的一阶中心差分

一阶微分的差商表示

与 x_i 点相邻两点的泰勒展开式可以写为

$$f(x_i - h) = f(x_i) - hf'(x_i) + \frac{h^2}{2} f''(x_i) - \frac{h^3}{3!} f'''(x_i) + \frac{h^4}{4!} f^{(4)}(x_i) - \dots$$

$$f(x_i + h) = f(x_i) + hf'(x_i) + \frac{h^2}{2} f''(x_i) + \frac{h^3}{3!} f'''(x_i) + \frac{h^4}{4!} f^{(4)}(x_i) + \dots$$

两式相减，并忽略 h 的平方和更高阶的项得到一阶微分的中心差商

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_i + h) - f(x_i - h)}{2h}$$

一阶微分的向前和向后退一阶差商表示

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_i + h) - f(x_i)}{h}$$

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_i) - f(x_i - h)}{h}$$

二阶微分的差商表示

两式相加，忽略 h 的立方和更高阶的项得到二阶微分的中心差商

$$f''(x_i) \approx \frac{f(x_i + h) - 2f(x_i) + f(x_i - h)}{h^2}$$

我们就可以构造出微分方程的差分格式。

在构造差分格式时，究竟应该选择向前，向后还是中间差分或差商来代替微分方程中的微分或微商，应当根据由此得到的差分方程解的稳定性和收敛性来考虑。同时兼顾到差分格式的简单和求解的方便。

偏微分

对于 $f=f(x,y)$ 的情况，拉普拉斯算符在0点作用在此函数上的值，也可以用临近的点上的函数值表示出来。

$$\nabla^2 f = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right)$$

$$h_1 = h_2 = h_3 = h_4 = h$$

j+1	(i-1, j+1)	(i, j+1)	2	(i+1, j+1)
			h2	
	3	0	1	
j	(i-1, j)	(i, j)		(i+1, j)
		h3	4	h4
				(i+1, j-1)
j-1	(i-1, j-1)	(i, j-1)	h1	
	j-1	j	i+1	

$$\nabla^2 f \approx \frac{f_1 + f_2 + f_3 + f_4 - 4f_0}{h^2} - \frac{2h^2}{4!} \left(\frac{\partial^4 f}{\partial x^4} + \frac{\partial^4 f}{\partial y^4} \right)$$

误差来源

(1) 方法误差（或截断误差）

例如上面我们介绍的差商表示中，采用泰勒展开式展开到第 $n+1$ 项时的截断误差阶数为 $O(h^{n+1})$ 。具体方法的误差阶数取决于在离散化时的近似阶数。因此若改进算法就可以减小截断误差。

(2) 舍入误差（或计算误差）

由于计算机的有限字长而造成数据在计算机中的表示出现误差。在计算机运算的过程中，随着运算次数的增加舍入误差会积累得很大。如果在多次运算后，舍入误差的精度影响是有限的，那么这个算法是稳定的，否则是不稳定的。不稳定的算法不能用。

边界条件

利用微分的差分表示，将微分方程离散化为差分方程组的形式，所得的解完全取决于待求微分方程的特性。

边界条件的情况变化将会引起差分方程组的不同。在求解微分方程中，会遇到两类问题：

初始值问题：

部分边界上的函数值和部分的函数偏导值是给定的。通常在这类问题中的独立变量之一是时间 t 。

边值条件的问题：

边界上的信息是给定的。

我们仅讨论后一类问题。

三类边界条件

假定某方程形式上可以写为：

$$L\phi = q.$$

其中 L 为含偏微商的算符

它的边界条件一般可写为：

$$\phi|_G + g_1(s) \frac{\partial \phi}{\partial n} |_G = g_2(s).$$

G 表示场域 D 的边界， $g_1(s), g_2(s)$ 为边界上 s 点的逐点函数

(1) 第一类边界条件，或称为狄利克莱 (Dirichlet) 问题 ($g_1 = 0, g_2 \neq 0$)。

$$\phi|_G = g(s).$$

(2) 第二类边界条件，或称诺伊曼 (Neumann) 问题 ($g_1 \neq 0, g_2 = 0$)。

$$\frac{\partial \phi}{\partial n} |_G = g(s).$$

(3) 第三类边界条件，或称混合问题 ($g_1 \neq 0, g_2 \neq 0$)。

泊松方程

对于算符 L 为斯杜-刘维尔 (Sturm-Liouville) 算符的特定情况，即

$$L \equiv -\nabla(p\nabla) + f .$$

公式中的 p 和 f 是给定的函数。

一类很重要的微分方程：在流体力学、等离子物理、天体物理...等学科中，势函数起关键作用的许多问题当中的基本方程。

当 $p=1, f=0$ 时，得到上式的特殊情况—泊松(Poisson)方程。

1. 星系的运动
2. 不同束缚态条件下带电等离子体的特性研究
3. 核反应堆中中子的输运

考虑方程中 p 为常数的情况，二维的方程可以写为：

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + f(x, y)\phi = q(x, y)$$

设函数 ϕ 在区域 D 内满足方程式(区域 D 的边界为 G)。

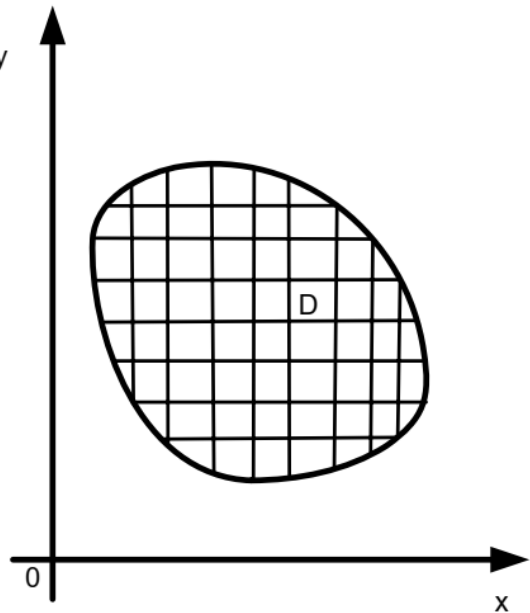
区域 D 离散化

通过网络划分方法把区域 D 离散为许许多多的小单元。

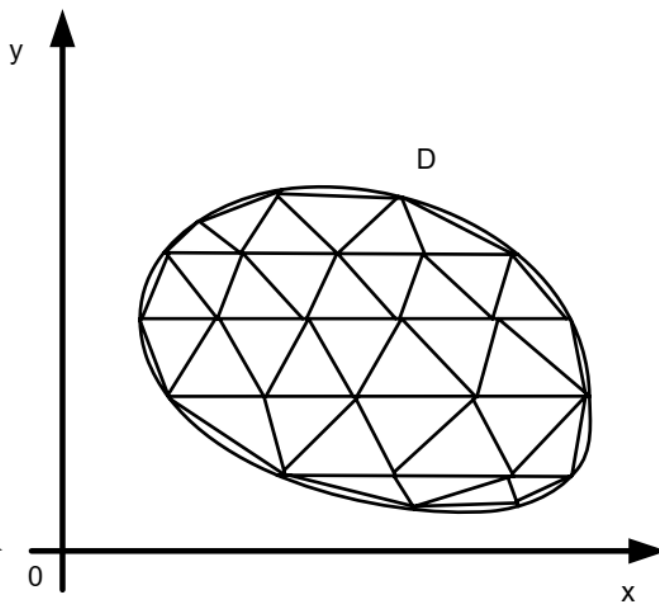
原则上这种网格分割是可以任意的，但实际应用中，常常是根据边界 G 的形状，采用最简单，最有规律，和边界的拟合程度最佳的方法来分割。

1. 正方形分割法和矩形分割法
2. 三角形分割法
3. 极网络格式（圆形区域）

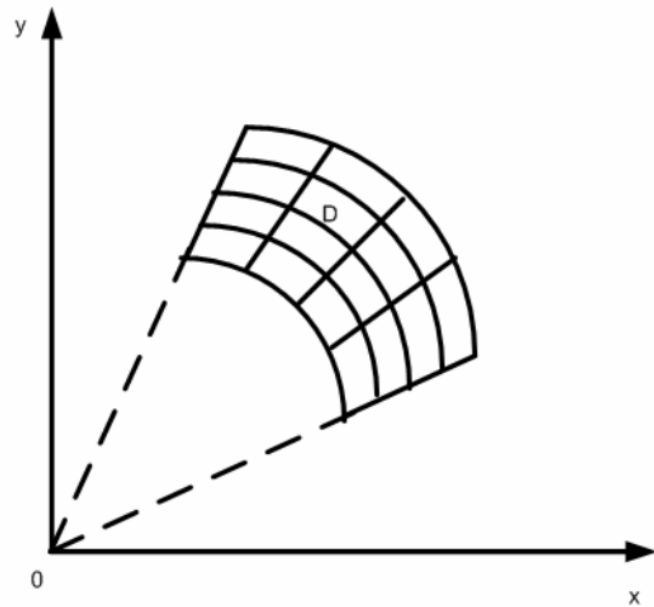
常用分割方法



矩形分割



三角形分割



极网络分割

这些网络单元通常称为元素，网络点称为节点。

节点上的函数值表示节点上的偏导值

取步长 h 不相等的最一般情况。 $\phi_0 \sim \phi_4$ 分别代表在节点0~4处 ϕ 的函数值。0点的一阶偏导数可以通过向前或向后的差商，由1和3节点近似写出。

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_0 \approx \frac{\phi_1 - \phi_0}{h_1} \quad \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_0 \approx \frac{\phi_0 - \phi_3}{h_3} \quad \text{单侧差商误差较大}$$

如果要寻求更精确的差分格式，我们可以引入待定常数 α 和 β ，由 ϕ_1 和 ϕ_3 的泰勒展开，构造出如下的关系式：

$$\alpha(\phi_1 - \phi_0) + \beta(\phi_3 - \phi_0) = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_0 (\alpha h_1 - \beta h_3) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_0 (\alpha h_1^2 + \beta h_3^2) + \dots$$

令 $\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_0$ 项的系数为零，则得到 α 和 β 之间应当满足

$$\alpha = -\frac{h_3^2}{h_1^2} \beta.$$

代入上式，并舍去高阶项，得到：

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_0 \approx \frac{h_3^2(\phi_1 - \phi_0) - h_1^2(\phi_3 - \phi_0)}{h_1 h_3 (h_1 + h_3)}.$$

当选用等步距 $h_1 = h_3 = h_x$ 时，上式成为

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_0 \approx \frac{\phi_1 - \phi_3}{2h_x}.$$

（此为**中心差商表达式**。）

二阶偏导数的差分表达式

如果令 $\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_0$ 的系数为零，则有 α 和 β 间存在关系式： $\alpha = \frac{h_3}{h_1} \beta$ 。

代入，并忽略 h 三阶以上的高次项，得到：

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_0 \approx 2 \frac{h_3(\phi_1 - \phi_0) + h_1(\phi_3 - \phi_0)}{h_1 h_3 (h_1 + h_3)}.$$

当用等步长 $h_1 = h_3 = h_x$ 时，上式成为

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_0 \approx \frac{\phi_1 - 2\phi_0 + \phi_3}{h_x^2}.$$

中间差商表达式

用完全相同的计算方法，我们可以推导出 $\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}\right)_0$ 的差分表达式：

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}\right)_0 \approx 2 \frac{h_4(\phi_2 - \phi_0) + h_2(\phi_4 - \phi_0)}{h_2 h_4 (h_2 + h_4)}.$$

当采用等步长 $h_2 = h_4 = h_y$ 时，有

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}\right)_0 \approx \frac{\phi_2 - 2\phi_0 + \phi_4}{h_y^2}.$$

二维方程的差分表达式：

$$(\nabla^2 \phi)_0 = 2 \left[\frac{h_3(\phi_1 - \phi_0) + h_1(\phi_3 - \phi_0)}{h_1 h_3 (h_1 + h_3)} + \frac{h_4(\phi_2 - \phi_0) + h_2(\phi_4 - \phi_0)}{h_2 h_4 (h_2 + h_4)} \right] + f_0 \phi_0 = q_0$$

如果在 x 和 y 方向的步长分别相等，即 $h_1 = h_3 = h_x$ 和 $h_2 = h_4 = h_y$ 时

$$\frac{\phi_1 - 2\phi_0 + \phi_3}{h_x^2} + \frac{\phi_2 - 2\phi_0 + \phi_4}{h_y^2} + f_0\phi_0 = q_0 ,$$

用角标来表示节点的标记：“五点格式”或“菱形格式”

$$\frac{1}{h_x^2}(\phi_{i+1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j}) + \frac{1}{h_y^2}(\phi_{i,j+1} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i,j-1}) + f_{i,j}\phi_{i,j} = q_{i,j}$$

特别是当 $h_x = h_y = h$ 时，我们得到：

$$\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1} + (h^2 f_{i,j} - 4)\phi_{i,j} = h^2 q_{i,j}$$

$f=0$ 是为泊松方程： $\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1} - 4\phi_{i,j} = h^2 q_{i,j}$

$f = q = 0$ 的时为拉普拉斯方程

$$\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1} - 4\phi_{i,j} = 0$$

边界条件的离散化处理

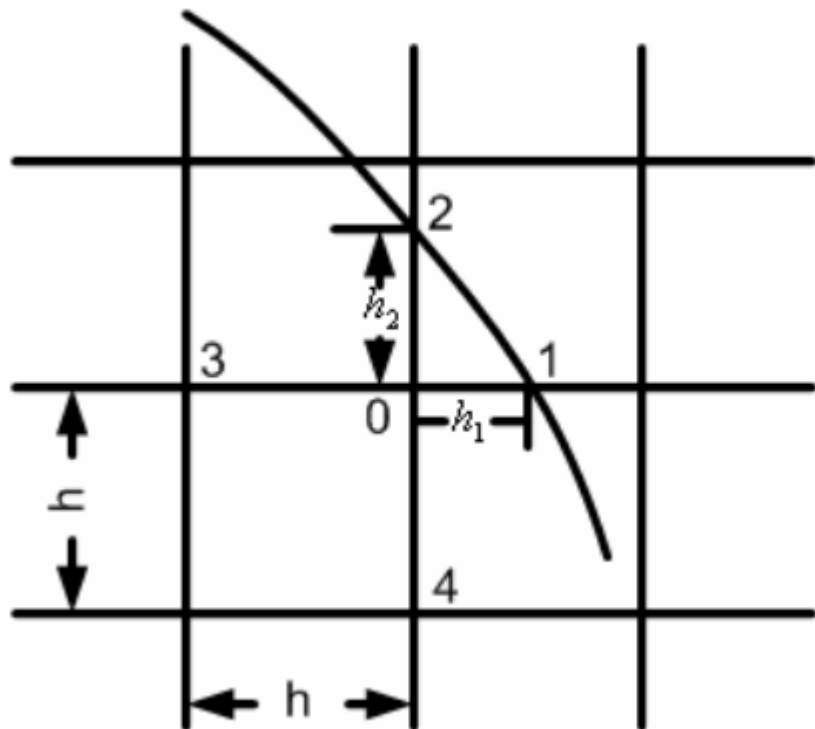
若场域的网络节点都落在边界 G 上，则无需再做处理。

一般情况下，边界 G 是不规则的，网络节点不可能全部都落在边界 G 上。对第一类边界条件，通常有两种处理方法。

1. **直接转移法**（比较粗糙）：如果 0 节点靠近边界，则取最靠近 0 点的边界节点上的函数值作为 0 点的函数值。
2. **线性插值法**：较为精确

对第二、三类边界条件也可以用插值法求出临近边界节点上的函数值。

直接转移法



场域的第一类边界条件

网格是按正方形分割，步长为 h 。0点为靠近边界 G 的一个网格节点，1和2为边界节点。我们取最靠近0点的边界节点1上的函数值作为0点的函数值，即 $\phi_0 \approx \phi_1$ 。

又称为零次插值法。

线性插值法

先判断 x 方向的边界节点1和 y 方向的边界节点2哪一个更靠近0点。如果1更靠近0点，则可以用 x 方向的线性插值给出0点的函数值：

$$\phi_0 = \frac{h\phi_1 + h_1\phi_3}{h + h_1}$$

如果边界节点2更靠近0点，则可以类似地用 y 方向2和4边界节点的函数值 ϕ_2 和 ϕ_4 的线性插值求出0点函数值 ϕ_0 ：

$$\phi_0 = \frac{h\phi_2 + h_2\phi_4}{h + h_2}$$

其中 h_1 和 h_2 分别为边界节点 1, 2 到 0 点的距离。这种方法的误差为 $O(h^2)$

双向插值法

如果 $h_1 = \alpha h$, $h_2 = \beta h$, 且 $h_x = h_y = h$, 0点附近的差分计算格式:

$$\frac{1}{\alpha(1+\alpha)}\phi_1 + \frac{1}{\beta(1+\beta)}\phi_2 + \frac{1}{1+\alpha}\phi_3 + \frac{1}{1+\beta}\phi_4 - \left(\frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\beta}\right)\phi_0 + \frac{h^2}{2}f_0\phi_0 = \frac{h^2}{2}q_0$$

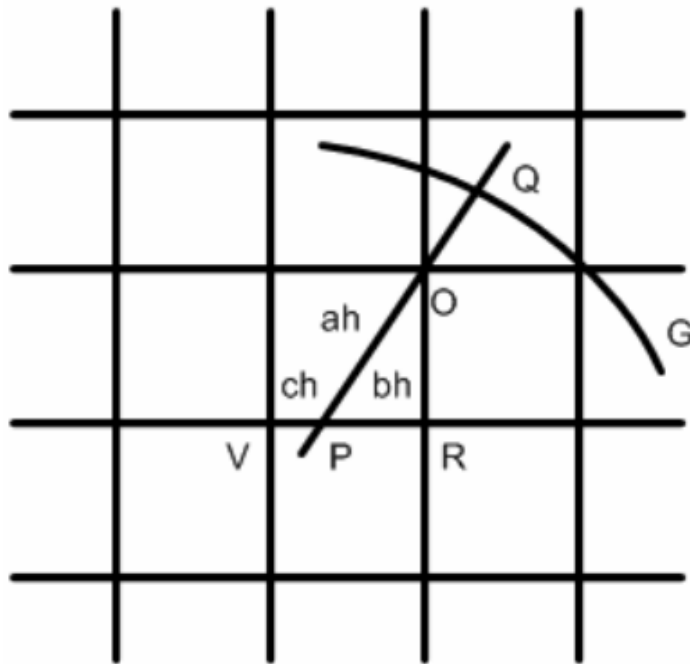
这种方法更为精确

第二类/第三类边界条件

第二类和第三类边界条件可以统一写为

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial n} + \alpha \phi \right) \Big|_G = g.$$

其中 $\alpha = 0$ 时，即为第二类边界条件； $\alpha \neq 0$ 时，即为第三类边界条件



过O点向边界G做垂线PQ交边界于Q点，交网线段VR于P，假定OP，PR和VP的长度分别为ah，bh和ch

场域的混合边界条件

$$\frac{\phi_0 - \phi_P}{ah} = \left(\frac{\partial \phi}{\partial n} \right)_o + O(h).$$

因为 P 点一般不是节点，其值应当以 V 点和 R 点的插值给出

$$\phi_P = b\phi_V + c\phi_R + O(h^2).$$

由于 $\left(\frac{\partial \phi}{\partial n} \right)_o = \left(\frac{\partial \phi}{\partial n} \right)_Q + O(h)$ ，则得到

$$\frac{1}{ah}(\phi_0 - b\phi_V - c\phi_R) = \left(\frac{\partial \phi}{\partial n} \right)_Q + O(h)$$

从边界条件，有关系式： $\left(\frac{\partial \phi}{\partial n} \right)_Q = -\alpha(Q)\phi_Q + g(Q)$

将 ϕ_Q 用 ϕ_o 来近似，就得到 o 点的差分计算公式

$$\frac{1}{ah}(\phi_o - b\phi_V - c\phi_R) + \alpha(Q)\phi_o = g(Q)$$

特殊情况

如 $\frac{\partial \phi}{\partial n}$ 与 x 方向平行

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial n}\right)_o = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_o \approx \frac{\phi_o - \phi_v}{h}.$$

得到 o 点的差分计算公式为

$$\frac{1}{h}(\phi_o - \phi_v) + \alpha(Q)\phi_o = g(Q).$$

如 $\frac{\partial \phi}{\partial n}$ 与 y 方向平行

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial n}\right)_o = \left(\frac{\partial \phi}{\partial y}\right)_o \approx \frac{\phi_o - \phi_R}{h}.$$

得到 o 点的差分计算公式为

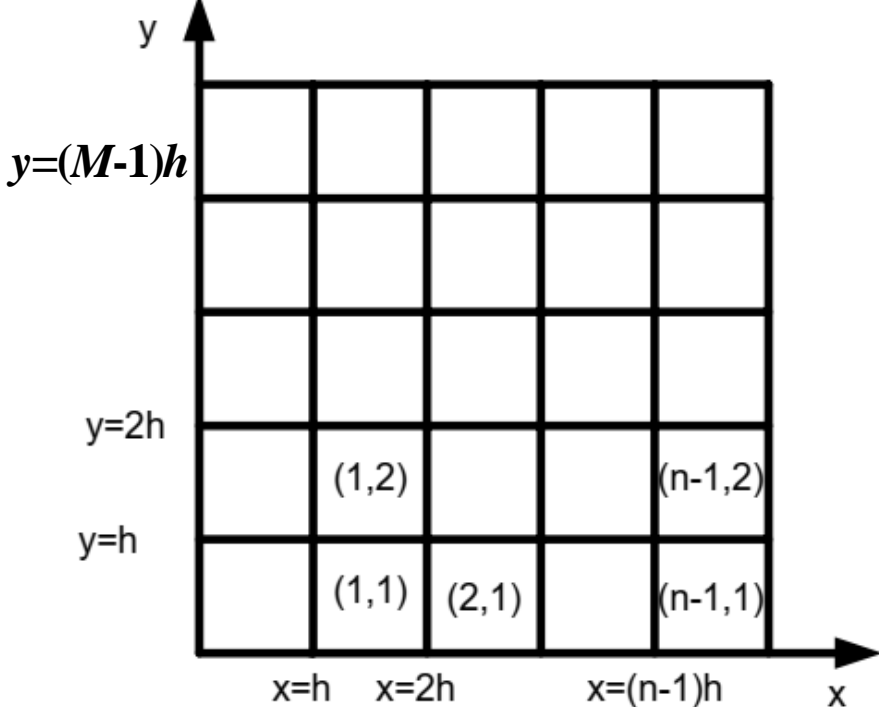
$$\frac{1}{h}(\phi_o - \phi_R) + \alpha(Q)\phi_o = g(Q)$$

有限差分方程组的迭代解法

假定在边界 G 上的狄里克莱问题，其求解的区域 D 是个单位矩形区间（ $0 \leq x, y \leq 1$ ）。我们在平行于 x 和 y 轴的方向分别用 $(N+1)$ 和 $(M+1)$ 个点以等步长作网络划分，边界 G 上的节点函数值为 $g_{i,j}$ 。则用 $(N+1)(M+1)$ 网格划分的单位矩形求解区间 D 中， x 和 y 方向的步长分别是 $h=1/N$ 和 $k=1/M$ 。

对这样的问题利用差分计算格式，并取 $M=N$ （即 $h=k$ ），则方程可以近似写为

$$\begin{aligned} \phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1} - [4 - h^2 f_{ij}] \phi_{ij} &= h^2 q_{ij} \quad , \quad \text{在区域 } D \text{ 内,} \\ \phi_{i,j} &= g_{i,j} \quad , \quad \text{在 } D \text{ 的边界 } G \text{ 上.} \end{aligned}$$



考虑 $f=0(f_{i,j}=0)$ 的特殊情况，此时要求解的是狄里克莱边界问题的泊松方程：

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = q(x, y) \quad , \quad \text{在 } D \text{ 内},$$

$$\phi|_G = g(p). \quad \text{在 } D \text{ 的边界 } G \text{ 上}$$

对应的差分方程组为：

$$\phi_{ij} - \frac{1}{4}(\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1}) = -\frac{h^2}{4}q_{ij} \quad , \quad \text{在 } D \text{ 内},$$

$$\phi_{i,j} = g_{i,j} \quad , \quad \text{在 } D \text{ 的边界 } G \text{ 上}.$$

引入 y 方向的层向量（也可以取 x 方向分层的层向量）

$$\phi_j = \begin{pmatrix} \phi_{1,j} \\ \phi_{2,j} \\ \vdots \\ \phi_{N-1,j} \end{pmatrix}, \quad q_j = -\frac{1}{4} \begin{pmatrix} h^2 q_{1,j} \\ h^2 q_{2,j} \\ \vdots \\ h^2 q_{N-1,j} \end{pmatrix}$$

并记

$$\Phi = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_{N-1} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{N-1} \end{pmatrix}$$

则方程组可以写为:

$$K\Phi = B$$

K 矩阵的形式为:

$$K = \begin{pmatrix} G & -I/4 & \cdots & 0 \\ -I/4 & G & -I/4 \cdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & -I/4 \\ 0 & \cdots & -I/4 & G \end{pmatrix}$$

I 是 $(N-1)^2$ 阶的单位矩阵。 G 为 $(N-1)^2$ 阶方阵, 其具体表示为

$$G = \begin{pmatrix} 1 & -1/4 & \cdots & 0 \\ 1/4 & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & -1/4 \\ 0 & \cdots & -1/4 & 1 \end{pmatrix}.$$

我们可以得到 $y = h$ 上各个节点的差分方程有如下形式

$$\begin{pmatrix} 1 & -1/4 & \cdots & 0 \\ -1/4 & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & -1/4 \\ 0 & & -1/4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{1,1} \\ \phi_{2,1} \\ \vdots \\ \phi_{N-1,1} \end{pmatrix} - \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{1,2} \\ \phi_{2,2} \\ \vdots \\ \phi_{N-1,2} \end{pmatrix} = \frac{-1}{4} \begin{pmatrix} h^2 q_{1,1} - g_{0,1} - g_{1,0} \\ h^2 q_{2,1} - g_{2,0} \\ \vdots \\ h^2 q_{N-1,1} - g_{N,1} - g_{N-1,0} \end{pmatrix} = b_1$$

即

$$G\phi_1 - \frac{1}{4}I\phi_2 = b_1 \quad .$$

同样沿 $y = 2h$ 上的各节点可以列出差分方程为

$$-\frac{1}{4}I\phi_1 + G\phi_2 - \frac{1}{4}I\phi_3 = b_2 \quad .$$

其中

$$b_2 = \frac{-1}{4} \begin{pmatrix} h^2 q_{1,2} - g_{0,2} \\ h^2 q_{2,2} \\ \vdots \\ h^2 q_{N-1,2} - g_{N,2} \end{pmatrix} \quad .$$

将求解微分方程变为求解线性代数方程

计算结果的收敛性检验

原则上，只要网格间距足够小，方程可以得到精确解。

差分方程的解不大可能与原来的偏微分方程的解完全相同，两者间的偏差是用差分公式代替偏微分所带来的。

在实践中，有必要在求解方程时采用不同的网格间距 h 来计算以检验结果的收敛性。

求解方程的三种方法

1. 直接法

这是通过求系数矩阵 K 的逆矩阵来得到方程的解

$$\Phi = K^{-1} B .$$

由于矩阵 K 的维数通常都很大，且计算机计算的舍入误差会引起数值结果的不稳定，因而在实际应用中还存在较大困难。但对象泊松方程这类问题的求解，用富里叶变换改写后，采用直接求解法计算会非常快。

2. 随机游走

3. 迭代法

在采用有限差分法求解微分方程的实践中得到**广泛应用的方法**，其中尤以超松弛迭代法的使用效果最佳。它实际上是一种极限方法，被用来求方程组的近似解。

系数矩阵 K 的特征

系数矩阵 K 是一个仅有少数不为零的元素的大型稀疏矩阵。

从五点格式中看出：它的每一行元素中非零元素的个数不超过5个。因而在程序中只需记存 K 中的非零元素及每个非零元素在此一维数组中地址码的信息便足够了，这样就可以极大节省计算机的存贮空间。

当边界与网格节点重合时， K 是个对称正定矩阵，其非零元素都是实数。可以证明这时的矩阵 K 有 $(N-1)^2$ 个正交本征向量，其对应的本征值为：

$$\lambda_{pq}(K) = 1 - \frac{1}{2}(\cos p\pi h + \cos q\pi h), \quad (p, q = 1, 2, \dots, N-1)$$

但是当边界与网格节点不重合时， K 的对称性将被破坏，矩阵通常是不可约的，因而该方程组不能由其中的某一部分单独求解。

雅可比法（直接迭代法）

$$\Phi = R\Phi + B \quad \text{其中 } R = I - K, \quad I \text{ 为单位矩阵}$$

如果已经得到一组势函数估计值 $\Phi^{(k-1)}$ ，则我们可以通过如下公式得到“改进”后的估计值 $\Phi^{(k)}$

$$\Phi^{(k)} = R\Phi^{(k-1)} + B, \quad \phi_i^{(k)} = \sum_j R_{ij} \phi_j^{(k-1)} + B_i$$

如果 K 为实对称矩阵，则 R 也应当是实对称矩阵，也称为雅可比迭代矩阵。它的一个重要特征是有一个特定的谱半径 $\rho(R)$ ，等于该矩阵最大本征值的绝对值。

从 K 的本征值表示式可知矩阵 R 的本征值为

$$\lambda_{pq}(R) = \frac{1}{2} (\cos p\pi h + \cos q\pi h), \quad (p, q = 1, 2, \dots, N-1)$$

开始时给出一组任意的猜测函数值 $\Phi^{(0)} = \{\phi_i^{(0)}\}$ ，我们可以证明在连续迭代后，得到的改进值会收敛到满足差分方程组的解 $\Phi = \{\phi_i\}$ 。设在第 k 次迭代后的一组误差为 $E_i^{(k)} = \phi_i^{(k)} - \phi_i$ ，初始时误差为 $E_i^{(0)} = \phi_i^{(0)} - \phi_i$ ，我们有

$$E^{(k)} = \Phi^{(k)} - \Phi = R\Phi^{(k-1)} + B - (R\Phi + B) = R(\Phi^{(k-1)} - \Phi) = RE^{(k-1)}$$

即

$$E^{(k)} = R^k E^{(0)}.$$

R^k 应当在 $k \rightarrow \infty$ 时收敛到零矩阵，迭代得到的值才收敛到满足微分方程的解，且与初始选择的 $\Phi^{(0)}$ 无关。数学上， $R^k \rightarrow 0$ 的条件是 R 矩阵的谱半径应满足不等式 $\rho(R) < 1$ 。 R 矩阵的每一行元素之和均小于 1，而只要有一行元素之和小于 1，则可保证 R 矩阵具有满足不等式 $\rho(R) < 1$ 的特性。因此在连续迭代后可以得到与初始估计值 $\Phi^{(0)}$ 无关的满足差分方程组的解。

定义误差矢量和迭代矩阵的范数为

$$\|E^{(k)}\| = \left(\sum_{i=1}^N e_i^{(k)^2} \right)^{1/2}, \quad \|R\| = \max_i \left(\sum_j |R_{ij}| \right).$$

谱范数 $\|R\|$ 表示当矩阵 R 作用在单位矢量上时被放大的最大因子

$$\|E^{(k)}\| \leq \|R\| \|E^{(k-1)}\|.$$

当 k 足够大时

$$\|E^{(k)}\| \approx \rho(R) \|E^{(k-1)}\|.$$

因此矩阵 R 的谱半径越接近1，则迭代收敛速度越慢。

直接迭代法的步骤

$$\phi_{i,j}^{(k+1)} = \frac{1}{4}(\phi_{i+1,j}^{(k)} + \phi_{i-1,j}^{(k)} + \phi_{i,j+1}^{(k)} + \phi_{i,j-1}^{(k)} - h^2 q_{i,j})$$

1. 任意给出各内节点处的初始函数值，然后代入上面方程的右端，求出各内节点的第一次迭代法的函数近似值；
2. 依次循环下去，以第 k 次迭代法的近似值来求出 $k+1$ 次的近似值。

缺点：

1. **松弛迭代法：**需要两套存贮单元，分别存贮相邻两次迭代的函数近似值，需占用的内存较大。
2. **收敛速度慢，没有什么实用价值。**

高斯-赛德尔迭代法

一种改进后比较好的迭代方法。它实际上是在 $k+1$ 次迭代中，将已经得到的某些相关节点上的第 $k+1$ 次迭代近似值代入进行计算。

具体地说，如果在沿 y 方向或 x 方向求得了 $y=(j-1)h$ 或 $x=(i-1)h$ 层的 $k+1$ 次迭代值，则可在 $y=jh$ 或 $x=ih$ 层节点的计算中，将临近的点上已有的 $k+1$ 次迭代值代入进行计算。这实际上就是将直接迭代公式做如下的改写：

$$\phi_{i,j}^{(k+1)} = \frac{1}{4}(\phi_{i+1,j}^{(k)} + \phi_{i,j+1}^{(k)} + \phi_{i-1,j}^{(k+1)} + \phi_{i,j-1}^{(k+1)} - h^2 q_{i,j})$$

与迭代式对应的矩阵形式，

$$\Phi_{GS}^{(k+1)} = L\Phi^{(k+1)} + U\Phi^{(k)} + B$$

其中矩阵间存在关系式 $L+U=I-K=R$ 。 L 矩阵的所有对角线和对角线以上的元素为零，而 U 矩阵则所有对角线和对角线以下的元素为零。该迭代方法的误差矢量是以下面公式逐步减小的

$$\|E^{(k)}\| = \rho^2(R)\|E^{(k-1)}\|$$

超松弛迭代法

高斯-赛德尔迭代方法在起始阶段的收敛速度可能比简单的直接迭代法快些，但仍然不是很理想。

为了加快收敛速度，通常引入一个**松弛因子** ω ，而把用迭代计算出的结果作为一个中间结果

$$\bar{\phi}_{i,j}^{(k+1)} = \frac{1}{4} (\phi_{i+1,j}^{(k)} + \phi_{i,j+1}^{(k)} + \phi_{i-1,j}^{(k+1)} + \phi_{i,j-1}^{(k+1)} - h^2 q_{i,j}).$$

取 $k+1$ 次迭代的最后近似值为 $\bar{\phi}_{i,j}^{(k)}$ 和 $\phi_{i,j}^{(k)}$ 的加权平均，即

$$\begin{aligned}\phi_{i,j}^{(k+1)} &= \phi_{i,j}^{(k)} + \omega(\bar{\phi}_{i,j}^{(k+1)} - \phi_{i,j}^{(k)}) = \omega\bar{\phi}_{i,j}^{(k+1)} + (1-\omega)\phi_{i,j}^{(k)} \\ &= \phi_{i,j}^{(k)} + \frac{\omega}{4} (\phi_{i+1,j}^{(k)} + \phi_{i,j+1}^{(k)} + \phi_{i-1,j}^{(k+1)} + \phi_{i,j-1}^{(k+1)} - h^2 q_{i,j} - 4\phi_{i,j}^{(k)}).\end{aligned}$$

$$\Phi^{(k)} = \Phi^{(k-1)} + \omega(\Phi_{GS}^{(k)} - \Phi^{(k-1)}) = \omega\Phi_{GS}^{(k)} + (1-\omega)\Phi^{(k-1)} = R_{\omega}\Phi^{(k-1)} + \omega(I - \omega L)^{-1}B$$

其中矩阵 L ， U 的定义同前。迭代矩阵 R_{ω} 的表示式为

$$R_{\omega} = (I - \omega L)^{-1}[\omega U + (1 - \omega)I].$$

可以推出：
$$E^{(k)} = R_{\omega}E^{(k-1)}$$

当 k 足够大时
$$\|E^{(k)}\| \lesssim \rho(R_{\omega})\|E^{(k-1)}\|$$

$\rho(R_{\omega})$ 为矩阵 R_{ω} 的谱半径。因此，**超松弛迭代法的收敛速度决定于松弛因子 ω 的选取。**

松弛因子 ω 的值的選擇标准：能减小矩阵 R_{ω} 的最大本征值的数值。

ω 的取值范围在 $1 \leq \omega \leq 2$ 时，收敛速度较好。当 $\omega=1$ 时，就是高斯-赛德尔迭代法。一般情况下确定 ω 的最佳值只能靠经验来选取。

对于正方形区域的第一类边值问题，最佳的 ω 可从理论上选为

$$\omega_0 = \frac{2}{1 + \sin(\pi / \ell)}$$

$\ell+1$ 为每边的节点数。若是矩形区域，用正方形网格分割，每边的节点数分别为 $\ell+1$ 和 $m+1$ ，则可选取

$$\omega_0 = 2 - \pi \sqrt{2 \left(\frac{1}{\ell^2} + \frac{1}{m^2} \right)}$$

只要超松弛因子 ω 选得合适，就可以大大地加快收敛速度。

迭代精度判断

迭代精度要求： $|\phi_i^{(k)} - \phi_i| < \varepsilon \phi_i$

由于事先不可能知道满足方程的函数值 $\Phi = \{\phi_i\}$ ，要决定迭代值是否满足精度要求，可以采用判断不等式

$$\frac{\|\Delta^{(k)}\|}{\|\Phi^{(k)}\|} < \varepsilon$$

如果满足，则迭代可以结束。其中 ε 为设定的相对精度值，移位矢量 $\Delta^{(k)}$ 的定义为

$$\Delta^{(k)} = \{\Delta_i^{(k)}\} \equiv \{|\phi_i^{(k)} - \phi_i^{(k-1)}|\}$$

一般将 ε 取得比要求的精度要小10倍以上，以保证实际所要求的精度。

求解泊松方程的直接法

利用迭代法来求解差分方程组往往计算量非常大，尤其会涉及大量的反复计算。虽然可以采用上一节中介绍的一些方法来加快有限差分法数值求解的收敛速度，但效果有限。

我们将会用到**直接法**求解。本节我们介绍Hockney于1970年提出的基于有限傅立叶级数展开和循环相消法的直接求解法。

一个非常简单的第一类边界条件下的泊松方程的求解

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = q(x, y), \quad (x, y) \in D,$$

$$\phi|_G = 0, \quad (G \text{ 为 } D \text{ 的边界}).$$

其中场域 D 为一个边长为 L 的正方形，在边界 G 上的势函数值均为零。

采用离散傅立叶级数展开的方法，将任意周期性函数， $f(x)=f(x+mL)$, ($m=1,2,\dots$), L 为周期，做离散傅立叶级数展开：

$$f(x) = \frac{A_0}{2} + \sum_{j=1}^{\infty} \left[A_j(x) \cos\left(\frac{2\pi jx}{L}\right) + B_j(x) \sin\left(\frac{2\pi jx}{L}\right) \right]$$

对正方形场域 D 内任意确定的 x 值，将位势函数 $\phi(x, y)$ 做以 y 为变量的有限傅立叶级数展开，则得到对应的有限傅立叶级数为

$$\phi(x, y) = \frac{A_0}{2} + \sum_{j=1}^{n/2} \left[A_j(x) \cos\left(\frac{2\pi jy}{L}\right) + B_j(x) \sin\left(\frac{2\pi jy}{L}\right) \right]$$

这里取 $L = n\Delta x = n\Delta y$ 。

考虑到将采用快速傅立叶变换，我们取 $n=2^k$ （ k 为正整数）。又注意到边界上位势为零的特殊情况，上式中傅立叶级数的系数为

$$A_0(x) = 0, \quad A_j(x) = 0, \quad B_j(x) = \frac{2}{L} \int_0^L \phi(x, y) \sin\left(\frac{2\pi jy}{L}\right) dy, \quad (j = 1, 2, \dots, n/2)$$

$$\phi(x, y) = \sum_{j=1}^{n/2} B_j(x) \sin\left(\frac{2\pi jy}{L}\right)$$

代入泊松方程，并利用三角函数的正交特性，则得到系数 $B_j(x)$ 满足的方程为

$$B_j''(x) - \frac{4\pi^2 j^2}{L^2} B_j(x) = C_j(x) \quad (j = 1, 2, \dots, n/2)$$

C_j 是电荷分布 $q(x, y)$ 对确定的 x ，以 y 为变量的傅立叶级数展开的系数

$$C_j(x) = \frac{2}{L} \int_0^L q(x, y) \sin\left(\frac{2\pi j y}{L}\right) dy.$$

通过有限傅立叶级数展开，已经把求解满足泊松方程的势函数 $\phi(x, y)$ 值的问题变成了计算与之对应的系数 $B_j(x)$ 值（在此问题中 $A_j(x)=0$ ）。

采用差分法来解微分方程：

首先对该正方形场域 D 采用正方形分割法离散化，即选择 x 和 y 方向等步长 h 的网格划分，使得 $L=nh$ 。然后将方程改变为差分方程，将任意一个网络的内节点 $xi=ih$ 上系数函数 $B_j(x)$ 的微商值，用临近两节点的函数值来表示。

为表示方便，我们记系数 $B_j(x_i)$ 为 $B_j^{(i)}$ ，对应的差分方程为

$$B_j^{(i-1)} - \lambda_j B_j^{(i)} + B_j^{(i+1)} = h^2 C_j^{(i)}, \quad (i = 1, 2, \dots, (n-1), \quad j = 1, 2, \dots, n/2)$$

其中：

$$\lambda_j = \left(\frac{4\pi^2 j^2 h^2}{L^2} + 2 \right),$$
$$C_j^{(i)} = \frac{2}{n} \sum_{m=0}^n q_{i,m} \sin\left(\frac{2\pi mj}{n}\right)$$

由于边界上位势为零的条件要求，在边界节点上的系数 $B_j^{(0)}$ 和 $B_j^{(n)}$ 都必须为零。采用直接法对差分方程组求解，就是在确定的 $y_j=jh$ 层的网格节点上，计算 $n/2$ 个系数值 $B_j^{(i)}$ ($j=1, 2, \dots, n/2$)。

通过这些系数值，就可以构造出计算内节点上势函数值的公式

$$\phi(x_i, y_k) = \sum_{j=1}^{n/2} B_j^{(i)} \sin\left(\frac{2\pi jk}{n}\right)$$

求解步骤分为三步：

- (1) 对电荷分布函数做离散傅立叶变换；
- (2) 求解方程组中的 $n(n-1)/2$ 个系数 $B_j^{(i)}$ ；
- (3) 利用 $B_j^{(i)}$ 的数值做傅立叶分析，就得到位势函数的解。

循环相消方法

上述三步求解步骤，计算量一般还是很大的。但我们可以采用一些数学技巧：

1. 由于我们取 $n=2^k$ （其中 k 为正整数），因而我们可以在第一和第三步中采用快速傅立叶变换的方法；
2. 方程组还可以采用循环相消的方法来求解。

下面我们以一个例子来说明循环相消方法的求解步骤。将方程的场域 D 作进一步的简化：在 x 和 y 方向上分别将正方形场域 D 划分为仅只有 8×8 个小区间，即 $L=nh$ ($n=8$)。对任意的 ($j=1,2,\dots,8$)，我们可以将方程组中三个含 i 点的函数值的方程写出

$$\begin{aligned} B_j^{(i-2)} - \lambda_j B_j^{(i-1)} + B_j^{(i)} &= h^2 C_j^{(i-1)} \\ B_j^{(i-1)} - \lambda_j B_j^{(i)} + B_j^{(i+1)} &= h^2 C_j^{(i)} \\ B_j^{(i)} - \lambda_j B_j^{(i+1)} + B_j^{(i+2)} &= h^2 C_j^{(i+1)}, \quad (i = 1, 2, \dots, 8) \end{aligned}$$

公式已将 x 方向节点上的系数值联系在一起。将 λ_j 乘上上面方程组中的第二式，再与另外两个公式相加，就得到

$$B_j^{(i-2)} - \lambda_j' B_j^{(i)} + B_j^{(i+2)} = h^2 C_j^{(i)'}, \quad (i=2, 4, 6)$$

其中我们定义

$$\lambda_j' \equiv \lambda_j^2 - 2, \quad C_j^{(i)'} \equiv C_j^{(i-1)} + \lambda_j C_j^{(i)} + C_j^{(i+1)}.$$

按照上面一样的处理办法，我们又可以得到

$$B_j^{(i-4)} - \lambda_j'' B_j^{(i)} + B_j^{(i+4)} = h^2 C_j^{(i)''}, \quad (i=4)$$

即
$$B_j^{(0)} - \lambda_j'' B_j^{(4)} + B_j^{(8)} = h^2 C_j^{(4)''}.$$

$$\lambda_j'' \equiv (\lambda_j')^2 - 2, \quad C_j^{(i)''} \equiv C_j^{(i-1)'} + \lambda_j' C_j^{(i)'} + C_j^{(i+1)'}$$

1. $B_j^{(4)}$ 可以用已知的边界节点系数值 $B_j^{(0)}$ ， $B_j^{(8)}$ 和系数 $C_j^{(i)}$ 来得到；
 2. 再取 i 分别为2和6，则 $B_j^{(2)}$ 和 $B_j^{(6)}$ 也可以用已知的数值表示；
 3. 最后，用所有已经得到的数值代入方程，就可以计算出剩下的系数
- 这样对于边界上势函数为零的泊松方程求解问题就完全解决了。

循环相消方法的操作就是对差分方程组做连续相消，直到只剩下少量可以求解的方程组。

这种方法的应用范围有限，它只适合于具有特殊类型的边界条件情况，并且在实际应用中，其运算往往也比上面所举的简单例子中要复杂得多。

但是在某些特殊情况下，尽管计算复杂些，但是仍然比超松弛迭代法要快。

关于周期性边界条件下的泊松方程的求解也可以采用上述方法。