偏微分方程数值解

中国科学技术大学 数学学院

张 梦 萍

办公室：东区–管理科学楼1227室

0551-63601855；mpzhang@ustc.edu.cn；2024-09

第一部分：一维线性偏微分方程初值问题的有限差分方法

第三章：模型方程—扩散方程

本章以模型方程的初值问题为例，介绍有限差分方法的构造，及其基本概念、性质和理论

1 常系数扩散方程初值问题

考虑常系数的扩散方程的初值问题：

$\begin{cases} u_t = u_{xx} & -\infty < x < \infty, t > 0 \\ u(x,0) = f(x) & -\infty < x < \infty \end{cases}$；其初值 $f(x)$ 为 2π 周期的周期函数。

一、 常系数扩散方程的初值问题的解

设初值为：$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{\omega=-\infty}^{\infty} e^{i\omega x} \hat{f}(\omega)$，则解为：

$$u(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{\omega=-\infty}^{\infty} e^{-\omega^2 t} \hat{f}(\omega) e^{i\omega x}$$

。

$\Rightarrow$ ：每个Fourier分量都随时间 t 的增大而衰减；对大的 ω，衰减是非常强的。而且，它不同于双曲型方程，它的传播速度是无限的。

此外，由Parseval关系得：

$\|u(\cdot,t)\|^2 = \sum_{\omega=-\infty}^{\infty} |e^{-\omega^2 t} \hat{f}(\omega)|^2 \leq \|f(\cdot)\|^2$

$\Rightarrow$：能量稳定

二、 有限差分方法

1. （时间）向前Euler方法（FTCS）—-二层显式格式

$$v_j^{n+1} = (I + \Delta t D_+ D_-) v_j^n = v_j^n + \frac{\Delta t}{h^2}(v_{j+1} - 2v_j^n + v_{j-1}^n)$$

稳定性：$\sigma \le \frac{1}{2}$时，格式稳定。

截断误差：

$T_j^n = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} - \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2}$

$= \frac{1}{2}\Delta t u_{tt}(x_j, t_n) - 2\frac{h^2}{3!}u_{xxx}(x_j, t_n) + O(h^3 + \Delta t^2) = O(h^2 + \Delta t)$

2. 蛙跳格式（CTCS）—-多层格式

$$v_j^{n+1} = v_j^{n-1} + 2\Delta t D_+ D_- v_j^n = v_j^{n-1} + 2\frac{\Delta t}{h^2}(v_{j+1}^n - 2v_j^n + v_{j-1}^n)$$

稳定性：本方法不稳定，格式无效。$\Rightarrow$：需要修正

将CTCS格式中 v_j^n 项用 $\frac{1}{2}(v_j^{n+1} + v_j^{n-1})$ 近似，得到Dufort-Frankel格式：

$$v_j^{n+1} = v_j^{n-1} + 2\frac{\Delta t}{h^2}(v_{j+1}^n - v_j^{n+1} - v_j^{n-1} + v_{j-1}^n)$$

$\Rightarrow$： $v_j^{n+1} = \frac{1}{1+2\sigma}(2\sigma(v_{j+1}^n + v_{j-1}^n) + (1-2\sigma)v_j^{n-1})$

稳定性：D-F格式是无条件稳定的，且是显式格式。

截断误差： $T_j^n = \frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t} - \frac{u_{j+1}^n - u_j^{n+1} - u_j^{n-1} + u_{j-1}^n}{h^2}$

$= (u_t - u_{xx} + \frac{\Delta t^2}{h^2}u_{tt} + O(\Delta t^2 + h^2 + \frac{\Delta t^4}{h^2}))|_j^n$

$\Rightarrow$： 若： $\lim_{h,\Delta t \to 0} \frac{\Delta t}{h} = 0$， 则： $\lim_{h,\Delta t \to 0} T_j^n = 0$。

如：取 $\Delta t = c \cdot h^{1+\delta}$，且 $\delta > 0$，则有：$T_j^n = O(h^{2\delta})$。当我们取 $\delta = 1$，即：$\Delta t = c \cdot h^2$，则格式的精度为（2,2）阶，与CTCS格式精度一致。

3. （时间）向后Euler方法（BTCS）–隐式格式

$$(I - \Delta t D_+ D_-) v_j^{n+1} = v_j^{n+1} - \frac{\Delta t}{h^2}(v_{j+1}^{n+1} - 2v_j^{n+1} + v_{j-1}^{n+1}) = v_j^n$$

稳定性：无条件稳定的

$\Rightarrow$：在计算中可以取 $\Delta t = h$。

截断误差：

$$\begin{aligned} T_j^{n+1} &= \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} - \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} \\ &= (u_t - u_{xx} - \tfrac{\Delta t}{2} u_{tt} - \tfrac{1}{12} h^2 u_{xxxx} + \cdots)|_j^{n+1} \\ &= O(\Delta t + h^2) \end{aligned}$$

整体误差：

$$\begin{aligned} v_j^{n+1} &= v_j^n + \sigma(v_{j+1}^{n+1} - 2v_j^{n+1} + v_{j-1}^{n+1}) \\ u_j^{n+1} &= u_j^n + \sigma(u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}) + T_j^{n+1}\Delta t \end{aligned}$$

整体误差：$e_j^{n+1} = v_j^{n+1} - u_j^{n+1}$ ；取 $E^n = \max_j |e_j^n|$

$E^{n+1} \le E^n + \bar{T}\Delta t \le \cdots \le E^0 + (n+1)\Delta t \bar{T}$

其中 $\bar{T} = \max_{j,n} |T_j^{n+1}|$；

若初值为准确值 $E^0 = 0$，$t_{n+1} = (n+1)\Delta t \le t_{end}$，则有：

$E^{n+1} \le \bar{T} t_{end} \le \frac{\Delta t}{2}(M_{tt} + \frac{1}{6\sigma} M_{xxxx}) t_{end}$

$\Rightarrow$：$\Delta t, h \to 0$ 时，$E^{n+1} \to 0$；即：数值解收敛于准确解，格式收敛。

4. Crank-Nicolson格式

$u_t = u_x = \frac{1}{2} u_x + \frac{1}{2} u_{xx}$，

$(I-\frac{\Delta t}{2}D_+D_-)v_j^{n+1}=(I+\frac{\Delta t}{2}D_+D_-)v_j^n$， $j=0,\cdots,J$

格式是无条件稳定的。

5. θ–方法

$$u_t=u_{xx}=\theta u_{xx}+(1-\theta)u_{xx}\,,$$

$$(I-\Delta t\theta D_+D_-)v_j^{n+1}=(I+\Delta t(1-\theta)D_+D_-)v_j^n\,,\quad j=0,\cdots,J\,;$$

其中 $0\le\theta\le1$。

$\Rrightarrow$：是关于 u_j^{n+1} 的三对角方程组：

$$-\theta\sigma v_{j-1}^{n+1}+(1+2\theta\sigma)v_j^{n+1}-\theta\sigma v_{j+1}^{n+1}=v_j^n+(1-\theta)\sigma(v_{j+1}^n-2v_j^n+v_{j-1}^n)$$

当 $1\ge\theta\ge\frac{1}{2}$ 时，$|\hat{Q}|\le1$。该格式是无条件稳定的。

$\Rrightarrow$：通常取 $1\ge\theta\ge\frac{1}{2}$；

$\theta=0$，为FTCS格式；$\theta=1$，为BTCS格式；

$\theta=\frac{1}{2}$，为Crank-Nicolson 格式

2　基于PDE的积分形式的有限差分格式的构造

常见的数值积分公式（回顾）

- 端点均为积分节点

  $n=1$（梯形公式）：$\int_{x_0}^{x_1} f(x)=\frac{h}{2}(f(x_0)+f(x_1))-\frac{h^3}{12}f''(\xi)$，$h=x_1-x_0$，$\xi\in(x_0,x_1)$

  $n=2$（Simpson公式）：$\int_{x_0}^{x_2} f(x)=\frac{h}{3}(f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2))-\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\xi)$，$h=x_2-x_1=x_1-x_0$，$\xi\in(x_0,x_2)$

- 端点均不为积分节点

  $n=0$（中点公式）：$\int_{x_{-1}}^{x_1} f(x)=2hf(x_0)+\frac{h^3}{3}f''(\xi)$，$h=x_1-x_0=x_0-x_{-1}$，$\xi\in(x_{-1},x_1)$

  $n=1$：$\int_{x_{-1}}^{x_2} f(x)=\frac{3h}{2}(f(x_0)+f(x_1))+\frac{3h^3}{4}f''(\xi)$，$h=x_2-x_1=x_1-x_0=x_0-x_{-1}$，$\xi\in(x_{-1},x_2)$

- 一个端点均为积分节点

  $\int_a^b f(x)=(b-a)f(a)+\frac{1}{4}(b-a)^2f'(\xi)$，$\xi\in(a,b)$

一、　剖分

用节点$0=x_0<x_1<\cdots<x_M=1$将$[0,1]$分成M个小区域(cell)；则涉及格点x_j的cell为:$I_j=[x_{j-\frac{1}{2}},x_{j+\frac{1}{2}}]$，$j=1,\cdots,M-1$。

用节点$0=t_0<t_1<\cdots<t_N=T$将$[0,T]$分成t个小区域$[t_n,x_{n+1}]$，$j=0,\cdots,M-1$。

二、　方程离散

考虑$u_t=u_{xx}+f(x,t)$，$(x,t)\in\bar{\Omega}=[0,1]\times[0,T]$

（一） 基于积分形式，构造以**函数的格点值**为未知数的有限差分格式

取时空区域$\Omega_j^n=[t_n,t_{n+1}]\times[x_{j-\frac{1}{2}},x_{j+\frac{1}{2}}]$为控制区域（控制体）。

讨论控制体Ω_j^n上，$u_t=u_{xx}+f(x,t)$的积分形式：

$\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}(u^{n+1}-u^n)dx$

$=\int_{t_n}^{t_{n+1}}((u_x)_{j+\frac{1}{2}}-(u_x)_{j-\frac{1}{2}})dt+\int_{t_n}^{t_{n+1}}\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}f(x,t)dxdt$

该方程式精确成立的。用不同的数值积分公式对上述方程中的积分做近似，得到不同的有限差分格式。

取时空区域$\Omega_j^n=[t_{n-1},t_{n+1}]\times[x_{j-\frac{1}{2}},x_{j+\frac{1}{2}}]$为控制区域（控制体）。

讨论控制体Ω_j^n上，$u_t=u_{xx}+f(x,t)$的积分形式：

$\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}(u^{n+1}-u^{n-1})dx=\int_{t_{n-1}}^{t_{n+1}}((u_x)_{j+\frac{1}{2}}-(u_x)_{j-\frac{1}{2}})dt+\int_{t_{n-1}}^{t_{n+1}}\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}f(x,t)dxd$

该方程式精确成立的。

（二） 基于积分形式，构造以**函数的网格平均**为未知数的有限差分格式

取时空区域$\Omega_j^n=[t_n,t_{n+1}]\times[x_{j-\frac{1}{2}},x_{j+\frac{1}{2}}]$为控制区域（控制体）。

$\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}(u^{n+1}-u^n)dx=\int_{t_n}^{t_{n+1}}((u_x)_{j+\frac{1}{2}}-(u_x)_{j-\frac{1}{2}})dt$

$+\int_{t_n}^{t_{n+1}}\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}f(x,t)dxdt$。该方程式精确成立的。

令$\bar{u}_j$、$\bar{f}_j$分别为在网格$[x_{j-\frac{1}{2}},x_{j+\frac{1}{2}}]$上的积分平均，即：$\bar{u}_j=\frac{1}{h}\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}f(x,t)dx$，$\bar{f}_j=\frac{1}{h}\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}f(x,t)dx$，则有：

$\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}(u^{n+1}-u^n)dx=h(\bar{u}_j^{n+1}-\bar{u}_j^n)$

$\int_{t_n}^{t_{n+1}}\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}f(x,t)dxdt=h\int_{t_n}^{t_{n+1}}\bar{f}_jdt$

$$h(\bar{u}_j^{n+1}-\bar{u}_j^n)=h\int_{t_n}^{t_{n+1}}\bar{f}_j dt+\int_{t_n}^{t_{n+1}}((u_x)_{j+\frac{1}{2}}-(u_x)_{j-\frac{1}{2}})dt$$

该方程式精确成立的。

作业–20241017：

参考书1：P70: 2.5.2, 2.5.3

补充作业1：针对$u_t=u_{xx}+f(x,t)$，$(x,t)\in\bar{D}=[0,1]\times[0,T]$的积分形式，构造以格点处的函数为未知数的有限差分格式；并导出其截断误差。

补充作业2：针对$u_t=u_{xx}$，基于其在控制体$\Omega_j^n=[t_{n-1},t_{n+1}]\times[x_{j-\frac{1}{2}},x_{j+\frac{1}{2}}]$上的积分形式，构造以函数的网格平均为未知数的有限差分格式，并给出精度。

3 用待定系数法构造高阶有限差分格式

构造高阶有限差分格式的关键是用构造导数的高阶近似。

待定系数法构造导数的高阶近似：用若干点的函数值的线性组合近似函数的导数（包括高阶导数）的方法

一、 均匀网格剖分

对于均匀剖分，可以论证：用u在三个点：$x_{j\pm1}=(j\pm1)h, x_j=jh$处的函数值的线性组合是无法得到$u_{xx}$的3阶近似。

$\Rrightarrow$：点的个数很重要。

讨论：是否可以用u在五个点：$x_{j\pm2}=(j\pm2)h, x_{j\pm1}=(j\pm1)h, x_j=jh$处的函数值的线性组合得到$u_{xx}$的4阶近似？

理论上：可通过多个点的函数值的线性组合得到导数的足够高阶的近似。

实际上：如果用的点太多（即：模板太大），将带来边界处理的困难。

二、 非均匀网格剖分

空间区域剖分：在很多情况下，为了减少计算量，空间区域的剖分要用非均匀剖分，尤其是对自适应算法。

取非均匀剖分：$x_{j+1}-x_j=\frac{3}{2}h$，$x_j-x_{j-1}=\frac{3}{4}h$。

用u在三个点：$x_{j\pm1}, x_j$处的函数值的线性组合近似u_{xx}

$\Rightarrow$：非均匀网格比均匀网格要复杂的多，且很难做分析研究。

对于缓变网格，可通过坐标变换，在变换平面进行

4 变系数扩散方程

考虑二种类型的变系数扩散方程：非守恒型扩散方程、守恒型扩散方程

4.1 非守恒型扩散方程

$u_t = b(x,t)u_{xx}, -\infty < x < \infty, t > 0$，其中热传导系数$b(x,t) > 0$。

1. FTCS格式：

$$v_j^{n+1} = (I + b_j^n \Delta t D_+ D_-)v_j^n = v_j^n + b_j^n \frac{\Delta t}{h^2}(v_{j+1}^n - 2v_j^n + v_{j-1}^n)$$

其中 $b_j^n = b(x_j, t_n)$。稳定性：

取谐波解 $v_j^n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\omega x_j} \hat{v}^n(\omega)$，放大因子:$\hat{Q} = (1 - 4b_j^n \sigma sin^2(\frac{\xi}{2}))$，$\xi = \omega h$，$\sigma = \frac{\Delta t}{h^2}$。

若要求：$|\hat{Q}| \leq 1$，则有：$b_j^n \sigma \leq \frac{1}{2}$；即：$b_j^n \sigma \leq \frac{1}{2}$时，格式稳定。

截断误差：

$T_j^n = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} - b_j^n \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} = O(h^2 + \Delta t)$

整体误差：$e_j^{n+1} = v_j^{n+1} - u_j^{n+1}$

$\Rightarrow$：$e_j^{n+1} = e_j^n + b_j^n \sigma (e_{j+1}^n - 2e_j^n + e_{j-1}^n) - T_j^n \Delta t$

假设B是$b(x,t)$在计算区域的最小上界；且T_j^n有上界：$\bar{T} = \max_{j,n} \sup |T_j^n|$；令$E^n = \max_j |e_j^n|$；若初值为准确值$E^0 =$

0，且 $B\sigma \le \frac{1}{2}$，则有

$\Delta t, h \to 0$ 时，$E^{n+1} \to 0$；即：数值解收敛于准确解，格式收敛。

BTCS格式：

$$v_j^{n+1} = v_j^n + b_j^{n+1}\Delta t D_+ D_- v_j^{n+1} = v_j^n + b_j^{n+1}\frac{\Delta t}{h^2}(v_{j+1}^{n+1} - 2v_j^{n+1} + v_{j-1}^{n+1})$$

2. θ–方法

$u_t = b(x,t)u_{xx} = b(x,t)(\theta u_{xx} + (1-\theta)u_{xx}) = \theta b(x,t)u_{xx} + (1-\theta)b(x,t)u_{xx}$，

$v_j^{n+1} = v_j^n + \Delta t b^*(\theta D_+ D_- v_j^{n+1} + (1-\theta)D_+ D_- v_j^n)$，

$j = 0, \cdots, J$； $0 \le \theta \le 1$；

其中 b^* 可以做多种选择，如 $b^* = \frac{b_j^{n+1} + b_j^n}{2}$ 、$b^* = b_j^{n+\frac{1}{2}}$ 等。

截断误差：为简单起见，取 $b^* = b_j^{n+\frac{1}{2}}$

$T_j^{n+\frac{1}{2}} = [(\frac{1}{2} - \theta)\Delta t u_{xxt} - \frac{b}{12}(\Delta x)^2 u_{xxxx} + \frac{1}{24}(\Delta t)^2 u_{ttt} - \frac{b}{8}(\Delta t)^2 u_{xxtt}$
$+ \frac{1}{12}(\frac{1}{2} - \theta)\Delta t(\Delta x)^2 u_{xxxxt} - \frac{2b}{6!}(\Delta x)^4 u_{xxxxxx} + \cdots]_j^{n+\frac{1}{2}}$

稳定性条件、收敛性条件均为：在所考虑的计算区域中的每一点都有：

$$\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}(1-\theta)b(x,t) \le \frac{1}{2}$$

4.2 守恒型扩散方程

$u_t = (b(x,t)u_x)_x$

一类方法：将守恒型扩散方程转换为非守恒型形式：$u_t = b(x,t)u_{xx} + b_x(x,t)u_x$，算法设计同上。这类方法的缺点：当 $b(x,t)$ 变化剧烈时，存在稳定性问题

另一类方法：考虑方程的守恒性质，取一个时空区域 Ω_j^n，对守恒型方程在 Ω_j^n 上积分，再利用数值积分公式，构造有限差分方法。

令 $\Omega_j^n = [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}] \times [t^n, t^{n+1}]$，则有：

$\int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} (u(x,t^{n+1}) - u(x,t^n))dx = \int_{t_n}^{t_{n+1}} ((bu_x)(x_{j+1/2},t) - (bu_x)(x_{j-1/2},t))dt$

这个方程是准确的，没有做任何近似

分别用中点公式、一个端点格式对积分做近似，得到：

$$\Delta x\left(v_j^{n+1} - v_j^n\right) = \Delta t\left(b_{j+1/2}^n \frac{v_{j+1}^n - v_j^n}{1/2\Delta x} - b_{j-1/2}^n \frac{v_j^n - v_{j-1}^n}{1/2\Delta x}\right)$$

$$v_j^{n+1} = v_j^n + \mu\,\Delta_-\left(b_{j+1/2}^n\,\Delta_+ v_j^n\right)$$

其中，$a_{j+1/2}^n = a(x_{j+1/2}, t^n)$. 具有（2，1）阶局部截断误差。

作业–20241021：

补充作业1：试证；（均匀剖分）用 u 在三个点：$x_{j\pm1} = (j\pm1)h, x_j = jh$ 处的函数值的线性组合是无法得到 u_{xx} 的3阶

或高于3阶的近似。

补充作业2：针对偏微分方程：$u_t = ((0.1 + \sin^2 x)u_x)_x$，构造(2,2)阶精度的有限差分格式。