

偏微分方程的数值解

Fuyang Tian

Institute for Applied Physics

School of Mathematics and Physics

University of Science and Technology Beijing

April 28, 2018



Outline

- 1 相关概念
 - 偏微分方程类型
 - 差分格式与稳定性



Outline

- 1 相关概念
 - 偏微分方程类型
 - 差分格式与稳定性
- 2 双曲型方程



Outline

- 1 相关概念
 - 偏微分方程类型
 - 差分格式与稳定性
- 2 双曲型方程
- 3 抛物型方程



Outline

- 1 相关概念
 - 偏微分方程类型
 - 差分格式与稳定性
- 2 双曲型方程
- 3 抛物型方程
- 4 椭圆方程
 - 椭圆型方程的差分格式
 - 三维拉普拉斯方程和泊松方程的差分格式



Outline

- ① 相关概念
 - 偏微分方程类型
 - 差分格式与稳定性
- ② 双曲型方程
- ③ 抛物型方程
- ④ 椭圆方程
 - 椭圆型方程的差分格式
 - 三维拉普拉斯方程和泊松方程的差分格式
- ⑤ 非线性



Outline

- 1 相关概念
 - 偏微分方程类型
 - 差分格式与稳定性
- 2 双曲型方程
- 3 抛物型方程
- 4 椭圆方程
 - 椭圆型方程的差分格式
 - 三维拉普拉斯方程和泊松方程的差分格式
- 5 非线性
- 6 有限元法



上节课

常微分方程(组)的初值问题的数值解法

- ① Euler折线方法-改进折线方法
- ② Runge-Kutta方法
- ③ 初值问题的差分方法
- ④ 刚性微分方程

边值问题的数值解法

- ① 差分法
- ② 打靶法

软件实现: matlab ode45

物理实例: 定态薛定谔方程的求解方法



偏微分方程的求解概述

物理问题的研究常通过数学物理方法归结为偏微分方程的求解。其求解方法有两类：

- ① 解析法：从物理问题(物理学量)所满足的偏微分方程出发, 通过合理的简化, 采用近似方法, 降低求解难度, 最终得出解的解析表达式(解析解)或用无穷级数之和表达。
- ② 数值计算方法：解决实际问题最普遍最有效的方法。实质是用适当的数学方法, 将求解区域内连续分布的待求函数离散化, 成为若干有限节点上分立的值, 从而把求解偏微方程问题归结为求解线性代数方程组的问题。求出了求解区域内有限个分立节点上的函数值, 就获得了区域内的待求函数分布, 即用数值解来代替解析解。



典型的偏微分方程

- ① 双曲型方程：弦振动方程

$$\nabla^2 E - \mu \varepsilon \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = 0 \text{ or } \nabla^2 E - \mu \varepsilon \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = F$$

- ② 抛物线方程：热传导方程

$$\nabla^2 E - \mu \gamma \frac{\partial E}{\partial t} = 0$$

- ③ 椭圆型方程：泊松方程和拉普拉斯方程

$$\begin{aligned} \nabla \times E &= 0 \\ \nabla \cdot E &= \rho / \varepsilon \end{aligned}$$

对于静电场的标量电位函数 φ , 又 $E = -\nabla\varphi$, 得静电场电位所满足的偏微分方程, i.e 泊松方程

$$\begin{aligned} \nabla^2 \varphi &= -\rho / \varepsilon. \\ \nabla^2 \varphi &= 0 \end{aligned}$$



有限差分方法

1. 用差商代替微商、用差分代替微分，把常微分方程变为代数方程然后进行数值求解。
2. 由于偏微分方程讨论的都是多元函数，用差商代替微商时会有多种可能性，形成各种不同的差分格式，因此经常会遇到差分格式的**稳定性问题**。
3. 有限差分法是一种以差分原理为基础的数值计算方法，它在用于偏微分方程的数值求解时，首先要通过网络状离散化模型，把求解区域内连续分布的待求函数成网格上的分立函数值，用各离散点上的差商来代替该点的偏导数，从而把需要求解的边值问题(微分方程)变为一组相应的差分方程(代数方程)，然后求解这组代数方程，可得出位于各离散点上的待求函数值，这个数值解就可用来近似连续场内的真实解。
4. 尽管为一种近似方法，但只要网格足够密、离散点足够多，依目前的计算机存储容量及运算速度，完全能够保证计算精度。



差分格式的稳定性

对于一个微分方程，在用差商代替微商时，所得到的差分方程必须近似原来的微分方程，其近似程度通常用**截断误差**来描述，差分格式的稳定性，也要用**截断误差**来判断。

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

$$u|_{t=0} = u(x, 0) = \varphi(x).$$

用两组平行线

$$x_k = kh, \quad t_j = j\tau$$

其中， k, j 均为整数，将 xt 平面划分为许多网格， h 是 x 方向的步长， τ 是 t 方向的步长，网格节点可用一对整数 (k, j) 来表示，i.e. $u_{k,j} = u(x, t_j) = u(kh, j\tau)$.



关于 t 的偏导数采用向前差商

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_{k,j} = \frac{u(x_k, t_{j+1}) - u(x_k, t_j)}{\tau} + O(\tau)$$

关于 x 的偏导数采用中心差商

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{k,j} = \frac{u(x_{k+1}, t_j) - u(x_{k-1}, t_j)}{2h} + O(h^2)$$

来代替, 则得到差分格式为

$$u_{k,j+1} = u_{k,j} - \frac{a\tau}{2h}(u_{k+1,j} - u_{k-1,j})$$

截断误差为 $O(\tau, h^2)$. 当 $\tau \rightarrow 0, h \rightarrow 0$ 时, 差分方程收敛于微分方程, 数学上称为差分格式与微分方程相容。

由于要从初始时刻逐步计算 t 时刻的微分方程的解, 要进行上万次的运算, 且计算机的字长有限, 每次都有舍入误差, 将使误差累积, 导致结果错误。



有效的差分格式必须能控制，具有对误差干扰的稳定性，差分格式稳定性的要求在于：初始的微小扰动在计算过程中增大的程度要有一定的限制；i.e. 如果初始条件有一些扰动或误差，在计算过程中随着时间的增长而误差呈衰减的话，则差分方程收敛于微分方程，是稳定的。

假设初始值受到一个扰动 ε_k , 受扰动的解为 $\tilde{u}_{k,j}$, 满足

$$\tilde{u}_{k,j+1} = \tilde{u}_{k,j} - \frac{a\tau}{2h}(\tilde{u}_{k+1,j} - \tilde{u}_{k-1,j})$$

$$\tilde{u}_{k,0} = \varphi_k + \varepsilon_k,$$

将上式与上面的式子相减，并记两个解的相差为 $v_{k,j} = \tilde{u}_{k,j} - u_{k,j}$, 则误差 $v_{k,j}$ 满足

$$v_{k,j+1} = v_{k,j} - \frac{a\tau}{2h}(v_{k+1,j} - v_{k-1,j})$$

$$v_{k,0} = \varepsilon_k$$



假定初始误差具有简谐波的形式

$$\varepsilon_k = e^{i\alpha\beta kh}$$

误差 $v_{k,j}$ 具有谐波的形式,

$$v_{k,j} = \lambda_k^j e^{i\alpha\beta kh}$$

式中 λ_k 为增长因子。将上式代入差分方程得,

$$\lambda = \lambda_k = 1 - i \frac{a\tau}{h} \cdot \sin\alpha h$$

得

$$|\lambda|^2 = 1 + \left(\frac{a\tau}{h}\right)^2 \sin^2\alpha h > 1$$

因此, 当 $\sin\alpha h \neq 0$ 时, 不论网格步长如何选取, 误差将不断增长, 所以上面设定的差分格式是不稳定的。



对偏微分方程:

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

$$u|_{t=0} = u(x, 0) = \varphi(x).$$

中对时间的偏导数的差商形式用中心平均值来代替,

$$u_{k,j} = \frac{u_{k+1,j} + u_{k-1,j}}{2}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u_{k,j+1} - \frac{u_{k+1,j} + u_{k-1,j}}{2}}{\tau} = \frac{2u_{k,j+1} - u_{k+1,j} - u_{k-1,j}}{2\tau}$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{k,j} = \frac{u(x_{k+1}, t_j) - u(x_{k-1}, t_j)}{2h} + O(h^2)$$

得差分方程

$$u_{k,j+1} = \frac{1}{2}(u_{k+1,j} + u_{k-1,j}) - \frac{a\tau}{2h}(u_{k+1,j} - u_{k-1,j})$$



仍采用上面的方法考虑其稳定性，令

$$u_{k,j} = \lambda^j e^{i\alpha kh}$$

代入差分方程，简化后得

$$\lambda = \cos\alpha h - i\frac{a\tau}{h}\sin\alpha h$$

从而得

$$\begin{aligned} |\lambda|^2 &= \cos^2\alpha h + \left(\frac{a\tau}{h}\right)^2 \sin^2\alpha h \\ &= 1 + \left[\left(\frac{a\tau}{h}\right)^2 - 1\right] \sin^2\alpha h. \end{aligned}$$

当 $|\frac{a\tau}{h}| \leq 1$ 时， $\lambda < 1$ ，误差 $v_{k,j} = \lambda^j e^{i\alpha kh}$ 将不随时间而无限增长，即满足有条件的稳定性。表明应用此差分格式，数值计算一阶偏微分方程初值问题时，必须注意时间步长和空间步长的选取，使之满足条件 $|\frac{a\tau}{h}| \leq 1$ 。



对流方程

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

其中, a 是不为零的常数, 数值求解的差分格式有:

1. 迎风格式:

$$\frac{u_k^{n+1} - u_k^n}{\Delta t} + \frac{a}{\Delta x} \begin{cases} (u_k^n - u_{k-1}^n), a > 0 \\ (u_{k+1}^n - u_k^n), a < 0 \end{cases} = 0$$

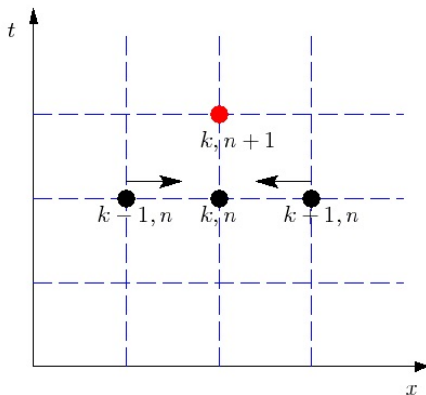
or

$$u_k^{n+1} = \begin{cases} (1-r)u_k^n + ru_{k-1}^n, a > 0 \\ (1+r)u_k^n - ru_{k+1}^n, a < 0 \end{cases}$$

$r = a\Delta t/\Delta x$, 时间微商用前差商近似, 空间微商对 $a > 0$ 用后差商近似, 对 $a < 0$ 用前差商近似, i.e. 所谓的“迎风”格式(up-wind scheme); 差分方向总是迎着流动方向, 或者说, 站在 k 点, 对于 $a > 0$, 波从 $k-1$ 点过来, $k-1$ 点状态已变化, $k+1$ 点状态还未变化。差分只能 $u_k^n - u_{k-1}^n$ 。同理可分析 $a < 0$ 。



迎风格式的精度为 $O(\Delta t, \Delta x)$, 稳定性条件为 $\Delta t < \Delta x/|a|$



一个时间步的物理量空间变化为:

```

if  $a < 0$ ,  $u(1:n-1) = (1+r)*u(1:n-1) - r*u(2:n)$ ;
else  $u(2:n) = (1-r)*u(2:n) + r*u(1:n-1)$ ;
end
    
```



2. 蛙跳格式

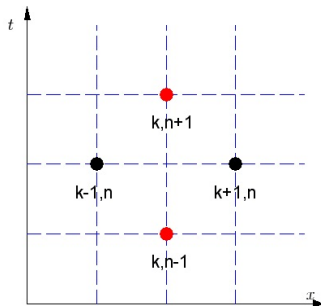
对时间和空间微商都采用中心差商近似

$$\frac{u_k^{n+1} - u_k^{n-1}}{2\Delta t} + a \frac{u_{k+1}^n - u_{k-1}^n}{2\Delta x} = 0$$

或

$$u_k^{n+1} = u_k^{n-1} - r(u_{k+1}^n - u_{k-1}^n)$$

其精度为 $O(\Delta t^2, \Delta x^2)$, 稳定性条件为 $\Delta t < \Delta x/|a|$ 。



3. FTCS格式 4. Lax格式

FTCS(forward time centered space), i.e. 时间微分取向前差商, 空间微分取中心差商

$$\frac{u_k^{n+1} - u_k^n}{\Delta t} + a \frac{u_{k+1}^n - u_{k-1}^n}{2\Delta x} = 0 \quad or$$

$$u_k^{n+1} = u_k^n - r(u_{k+1}^n - u_{k-1}^n)$$

其中 $r = a\Delta t/(2\Delta x)$.

Lax格式:

$$u_k^{n+1} = \frac{1}{2}(u_{k+1}^n + u_{k-1}^n) - \frac{a\Delta t}{2\Delta x}(u_{k+1}^n - u_{k-1}^n)$$

可视为将FTCS格式中的 u_k^n 采用邻近空间节点近似, i.e.

$$u_k^n \approx \frac{1}{2}(u_{k+1}^n + u_{k-1}^n).$$

精度为 $O(\Delta t, \Delta x^2/\Delta t, \Delta x^2)$, 稳定性条件为 $\Delta t < \Delta x/|a|$.



5. Lax-Wendroff格式 6. 两层加权平均格式

Lax-Wendroff格式:

$$u_k^{n+1} = u_k^n - \frac{a\Delta t}{2\Delta x}(u_{k+1}^n - u_{k-1}^n) + \frac{1}{2}\left(\frac{a\Delta t}{\Delta x}\right)^2(u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n)$$

此格式等效于两步格式

$$u_{k+1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{2}(u_{k+1}^n + u_k^n) - \frac{a\Delta t}{2\Delta x}(u_{k+1}^n - u_k^n)$$

$$u_k^{n+1} = u_k^n - \frac{a\Delta t}{\Delta x}(u_{k+1/2}^{n+1/2} - u_{k-1/2}^{n+1/2})$$

前步是半步Lax格式, 后步是半步蛙跳格

式。Lax-Wendroff格式的精度为 $O(\Delta t^2, \Delta x^2)$, 稳定性条件为 $\Delta t < \Delta x/|a|$ 。

6. 两层加权平均格式:

$$u_k^{n+1} = u_k^n - \frac{a\Delta t}{2\Delta x}[\theta(u_{k+1}^{n+1} - u_{k-1}^{n+1}) + (1-\theta)(u_{k+1}^n - u_{k-1}^n)]$$



其精度 $O(\Delta t, \Delta x^2)$, 稳定性条件为 $\theta \geq 1/2$ 。

- ① 当 $\theta = 1/2$ 时, 两层加权平均格式变为

$$u_k^{n+1} = u_k^n - \frac{a\Delta t}{4\Delta x}(u_{k+1}^{n+1} - u_{k-1}^{n+1} + u_{k+1}^n - u_{k-1}^n)$$

称为两层算术平均格式(k-Nicholson scheme), 精度为 $O(\Delta t^2, \Delta x^2)$, 这个格式是稳定的。

- ② 当 $\theta = 1$ 时, 两层加权平均格式为

$$u_k^{n+1} = u_k^n - \frac{a\Delta t}{2\Delta x}(u_{k+1}^{n+1} - u_{k-1}^{n+1})$$

称为全隐格式, 精度为 $O(\Delta t^2, \Delta x^2)$, 全隐格式是恒稳定的。

- ③ 当 $\theta = 0$ 时, $u_k^{n+1} = u_k^n - \frac{a\Delta t}{2\Delta x}(u_{k+1}^n - u_{k-1}^n)$, 为FTCS格式



Examples

- ① 设初始波形为方波，波速 $a=-1$ 采用迎风格式数值计算波的传播。

设 $r = a\Delta t/\Delta x$, $u_k^{n+1} = (1+r)u_k^n - ru_{k+1}^n$, $a < 0$.

- ② 用三种格式计算对流方程

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

采用周期边界条件。



弦振动方程的差分格式与稳定性

力学中的弦振动方程与时变电磁场中的波动方程均属于数学中双曲线型偏微分方程的混合问题，对于一维问题(i.e. 对于电磁场, 只考虑一个场分量), 用 $u(x, t)$ 表示所求的解, 混合问题可写为

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f(x, t) \\ u(x, 0) = \varphi(x) \\ \frac{\partial u}{\partial t}(x, 0) = \psi(x) \quad (0 \leq x \leq l) \\ u(0, t) = \mu_1(t) \\ u(l, t) = \mu_2(t) \end{array} \right.$$

这里的初始条件和边界条件必须满足相容性要求:

$$\varphi(0) = \mu_1(0), \quad \varphi(l) = \mu_2(0)$$



对求解空间和时间区域用网格 $x_k = kh$ ($k = 0, 1, 2, \dots, N$), $t_j = j\tau$, ($j = 0, 1, \dots, m$)进行离散化, 正数 h 和 τ 是 x 方向和 t 方向的步长。

1. 显式格式:

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{k,j} = \frac{u(x_{k+1}, t_j) - 2u(x_k, t_j) + u(x_{k-1}, t_j)}{h^2} + O(h^2)$$

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right)_{k,j} = \frac{u(x_k, t_{j+1}) - 2u(x_k, t_j) + u(x_k, t_{j-1}))}{\tau^2} + O(\tau^2)$$

可得差分格式

$$\begin{cases} u_{k,j+1} = s^2(u_{k+1,j} + u_{k-1,j}) + 2(1 - s^2)u_{k,j} - u_{k,j-1} + \tau^2 f_{k,j} \\ u(k, 0) = \varphi_k \\ \frac{u_{k,1} - u_{k,0}}{\tau} = \psi_k \\ u_{0,t} = \mu_{1,j}, u_{N,j} = \mu_{2,j} \end{cases}$$

其中 $s = a\frac{\tau}{h}$



抛物型方程

1. 线上法(method of lines, MOL): 对偏微分方程中的部分变量进行差分离散化, 而保留一个变量的微分, 如对扩散方程 $\partial u / \partial t = a \partial^2 u / \partial x^2$, 对空间 x 离散化 x_0, x_1, \dots, x_N

$$\frac{du_i}{dt} = \alpha(u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}), \quad i = 0, 1, \dots, N$$

其中 $\alpha = a / \Delta x^2$ 。问题变成了在时间方向上求解常微分方程组的初值问题, 只要给定初始条件 $u(x, 0)$, i.e.

$u_i(0) = u(x_i, 0)$, 则很容易得到数值解。

2. FTCS 和 Crank-Nicolson 差分方法:

以热传导方程为例,

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$



采用显式FTCS格式为

$$\frac{T_i^{l+1} - T_i^l}{\Delta t} = \kappa \frac{T_{i+1}^l - 2T_i^l + T_{i-1}^l}{\Delta x^2}$$

i.e.

$$T_i^{l+1} = T_i^l + \lambda(T_{i+1}^l - 2T_i^l + T_{i-1}^l)$$

$\lambda = \kappa \Delta t / (\Delta x)^2$, 收敛和稳定性条件是 $\lambda \leq 1/2$ 。采用隐式FTCS格式差分

$$\frac{T_i^{l+1} - T_i^l}{\Delta t} = \kappa \frac{T_{i+1}^{l+1} - 2T_i^{l+1} + T_{i-1}^{l+1}}{\Delta x^2}$$

$$-\lambda T_{i-1}^{l+1} + (1 + 2\lambda)T_i^{l+1} - \lambda T_{i+1}^{l+1} = T_i^l$$

或采用显式和隐式加权平均, i.e. Crank-Nicolson方法

$$\frac{T_i^{l+1} - T_i^l}{\Delta t} = \kappa \frac{1}{2} \left(\frac{T_{i+1}^l - 2T_i^l + T_{i-1}^l}{\Delta x^2} + \frac{T_{i+1}^{l+1} - 2T_i^{l+1} + T_{i-1}^{l+1}}{\Delta x^2} \right)$$

i.e.

$$-\lambda T_{i-1}^{l+1} + (1 + 2\lambda)T_i^{l+1} - \lambda T_{i+1}^{l+1} = \lambda T_{i-1}^l + 2(1 - \lambda)T_i^l + \lambda T_{i+1}^l$$

每求解一层都要解一次线性代数方程组。



3. 其他方法

$$\frac{\partial u}{\partial t} = b \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, b > 0$$

1. 蛙跳格式(dufort-frankel scheme)

$$u_k^{n+1} = u_k^n + \frac{2b\Delta t}{\Delta x^2} [(u_{k+1}^n + u_{k-1}^n) - (u_k^{n+1} + u_k^{n-1})]$$

蛙跳格式精度 $O(\Delta t^2, \Delta x^2, (\Delta t/\Delta x)^2)$, 蛙跳格式是恒稳定的。

2. 两层加权平均格式:

$$u_k^{n+1} = u_k^n + \frac{b\Delta t}{\Delta x^2} [\theta(u_{k+1}^{n+1} - 2u_k^{n+1} + u_{k-1}^{n+1}) + (1-\theta)(u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n)]$$

两层加权平均格式的精度 $O(\Delta t, \Delta x^2)$, 稳定性条件为

$$\theta > 1/2 \text{ 恒稳定}; 0 < \theta < 1/2, \Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2(1-2\theta)b}$$

当 $\theta = 1/2$ 时, 两层加权平均格式是两层算术平均格式, 或称为 Crank-Nicolson 方法, 精度为 $O(\Delta t^2, \Delta x^2)$, 恒稳定。 $\theta = 0$ 为显式格式

$$u_k^{n+1} = u_k^n + \frac{b\Delta t}{\Delta x^2} (u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n).$$

$\theta = 1$ 为全隐格式。



Examples

① 扩散方程:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad u(x, 0) = \sin(x), u(0, t) = 0, u(\pi, t) = 0$$

取 $\alpha = a/\Delta x^2 = 1$, 利用线上法数值求解 $u(x, t)$ 随时间的演化关系。

② 采用FTCS格式数值计算热传导方程

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

1. 设初始时刻在杆的中点温度分布呈 δ 函数形式, 计算整个杆中温度随时间演化;
2. 设开始时杆一端温度为 100°C , 另一端为 0°C , 计算长细棒中温度分布随时间的变化 ($k = 0.835$).



小结

双曲线型方程和抛物线方程的有限差分法数值求解问题，都含有初值问题和边值问题的混合问题，用有限差分法对上述问题进行数值计算时，须在空间区域和时间区域用差分网格对待求函数进行离散化，求得相应方程的差分公式，然后进行数值计算。

用差分解法来讨论这类含有初值的微分方程时，与不含初值问题的边值问题的椭圆型方程有着重要的区别：对含有初值问题的微分方程作数值计算时，在所考虑的网格区域内，某一网络点上的函数值是按层逐层进行计算的，在时间网格上第 j 层引入的误差，会影响 $j+1$ 层及以后各层的计算数值，所以必须考虑在初始时刻引入的计算误差对逐层计算过程中的影响问题，而所用的差分格式不同，误差的影响也不同，即差分格式的稳定性问题。

误差的影响在逐层计算过程中逐渐消失或保持有界，称此差分格式是稳定的；否则是不稳定的，不稳定的差分格式即使是收敛也是无意义的，因为误差的积累，随着计算次数和时间的增长而逐渐增大，导致与真解相差甚远。

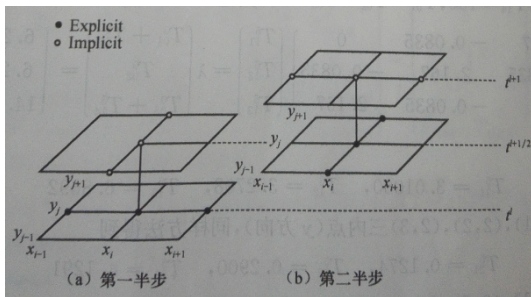


二维抛物型方程

对于二维空间的抛物型方程

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right)$$

将每一时间步分为两个半步



Continued

第一半步，沿 y 方向上走半个时间步

$$\frac{T_{i,j}^{l+1/2} - T_{i,j}^l}{\Delta t/2} = \kappa \left(\frac{T_{i+1,j}^l - 2T_{i,j}^l + T_{i-1,j}^l}{\Delta x^2} + \frac{T_{i,j+1}^{l+1/2} - 2T_{i,j}^{l+1/2} + T_{i,j-1}^{l+1/2}}{\Delta y^2} \right)$$

在 x 方向上是显式的，在 y 方向上隐式的，取 $\Delta x = \Delta y$ ， $\lambda = \kappa \Delta t / (\Delta x)^2$ ，化简得

$$-\lambda T_{i,j-1}^{l+1/2} + 2(1+\lambda)T_{i,j}^{l+1/2} - \lambda T_{i,j+1}^{l+1/2} = \lambda T_{i-1,j}^l + 2(1-\lambda)T_{i,j}^l + \lambda T_{i+1,j}^l$$

两边都是三对角矩阵方程。第二半步，沿 x 方向上再走半个时间步长

$$\frac{T_{i,j}^{l+1} - T_{i,j}^{l+1/2}}{\Delta t/2} = \kappa \left(\frac{T_{i+1,j}^{l+1} - 2T_{i,j}^{l+1} + T_{i-1,j}^{l+1}}{\Delta x^2} + \frac{T_{i,j+1}^{l+1/2} - 2T_{i,j}^{l+1/2} + T_{i,j-1}^{l+1/2}}{\Delta y^2} \right)$$

$$-\lambda T_{i-1,j}^{l+1} + 2(1+\lambda)T_{i,j}^{l+1} - \lambda T_{i+1,j}^{l+1} = \lambda T_{i,j-1}^{l+1/2} + 2(1-\lambda)T_{i,j}^{l+1/2} + \lambda T_{i,j+1}^{l+1/2}$$



Example

一个加热的铝平板四边分别保持恒定温度 100°C , 0°C , 75°C , 50°C (按上下左右), 采用隐式交替方向法求空间温度随时间的变化。

解: 设板 40×40 , 取 $\Delta x = \Delta y = 10$, 将空间分成 5×5 的网格点 (i, j) , $i, j=1, 2, 3$ 是内点, 其中 i 或者 $j = 0, 4$ 为边界点, 取时间步长 $\Delta t = 10$ 。对于 $k=0.835$, 则 $\lambda = k \Delta t / (\Delta x)^2 = 0.0835$, $a = 2(1 + \lambda) = 2.617$, $b = 2(1 - \lambda) = 1.833$ 。

对于第一个半步($t = 5$), 先应用到 $(1, 1)$, $(1, 2)$, $(1, 3)$ 三内点(y 方向)

$$-\lambda T_{10}^5 + aT_{11}^5 - \lambda T_{12}^5 = \lambda T_{01}^0 + bT_{11}^0 - \lambda T_{21}^0$$

$$-\lambda T_{11}^5 + aT_{12}^5 - \lambda T_{13}^5 = \lambda T_{02}^0 + bT_{12}^0 - \lambda T_{22}^0$$

$$-\lambda T_{12}^5 + aT_{13}^5 - \lambda T_{14}^5 = \lambda T_{03}^0 + bT_{13}^0 - \lambda T_{23}^0$$

$T_{10} = 0, T_{14} = 100, T_{01} = T_{02} = T_{03} = 75$, 其他 $T^0 = 0$, 得到



$$\begin{pmatrix} a & -\lambda & 0 \\ -\lambda & a & -\lambda \\ 0 & -\lambda & a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_{11}^5 \\ T_{12}^5 \\ T_{13}^5 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} T_{01}^0 + T_{10}^5 \\ T_{02}^0 \\ T_{03}^0 + T_{14}^5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6.2625 \\ 6.2625 \\ 14.6125 \end{pmatrix}$$

得 $T_{11}^5 = 3.01060, T_{12}^5 = 3.2708, T_{13}^5 = 6.8692$.再应用到(2,1), (2,2), (2,3)三内点(y方向), 再应用到(3,1), (3,2), (3,3)三内点(y方向).

对于第二半步 $t = 10$,先应用到(1,1), (2,1), (3,1)三内点(x方向), 再应用到(1,2), (2,2), (3,2)和(1,3), (2,3), (3,3).

重复上面计算, 时间步长 $\Delta t = 10$,计算出温度随时间的演化.



差分方法

偏微分方程中的椭圆型方程，如物理学中的拉普拉斯方程和泊松方程，是一个边值问题，需求解的物理量(函数值)仅由边界条件决定。

$$\begin{cases} \nabla^2 \varphi = -\rho/\varepsilon & (\Gamma) \\ \varphi|_{\Gamma} = f \end{cases}$$

ρ 是 Γ 域内的空间电荷密度分布函数，是坐标变量的函数。对于直角坐标系中的二维平面场，方程式第一式简化为

$$\nabla^2 \varphi = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = -\rho/\varepsilon$$

对于旋转对称的静电场，则可采用圆柱坐标系 (z, r, θ) ，若取 z 为对称轴，这时电位与方位角坐标 θ 无关，于是泊松方程简化为



$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial r^2} + \frac{\alpha}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial r} = -\rho/\varepsilon$$

式中 φ 为静电场电位。当 $\alpha = 1$,相应于旋转对称的场,则 (r, z) 是圆柱坐标系中的径向和轴向坐标;当 $\alpha = 0$,则相应于平面场,此时的 (r, z) 表示平面坐标系中的垂直坐标和水平坐标,即以 r, z 表示原来的 y, x 。

为了用有限差分方法来求上式的第一类边值问题数值解,必须在旋转对称场的平面场的横截面 zr 平面上,把求解区域的连续场进行离散化,具体说来用两族平行于坐标轴的直线

$$\begin{cases} z = 0, \pm h_1, \pm 2h_1, \dots, \pm mh_1 \\ r = 0, \pm h_2, \pm 2h_2, \dots, \pm nh_2 \end{cases}$$

构成等距($h_1 = h_2$)或不等距($h_1 \neq h_2$)网格划分这区域。网格线的交点称为节点,相邻节点之间的距离称为步长。此时,方程在某点的偏微商可用该点的差商来代替,从而使微分方程被相应的差分方程所代替。



用数值分析方法求出了网格上的电位值，可作为微分方程的近似解，通常为使问题简化，区域内部网格的划分采用有规律的形式，如正方形网格、矩形网格。但在靠近边界的节点则需采用不等间距的网格。

$$\begin{cases} \varphi_1 = \varphi_0 - h\left(\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right)_0 + \frac{h^2}{2!}\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}\right)_0 - \cdots, \\ \varphi_2 = \varphi_0 + h\left(\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right)_0 + \frac{h^2}{2!}\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}\right)_0 + \cdots, \\ \varphi_3 = \varphi_0 - h\left(\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right)_0 + \frac{h^2}{2!}\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial r^2}\right)_0 - \cdots, \\ \varphi_4 = \varphi_0 + h\left(\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right)_0 + \frac{h^2}{2!}\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial r^2}\right)_0 + \cdots, \end{cases}$$

得

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}\right)_0 = \frac{1}{h^2}\varphi_1 + \frac{1}{h^2}\varphi_2 - \frac{2}{h^2}\varphi_0 + O(h^2), \\ \left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial r^2}\right)_0 = \frac{1}{h^2}\varphi_3 + \frac{1}{h^2}\varphi_4 - \frac{2}{h^2}\varphi_0 + O(h^2), \\ \left(\frac{1}{r}\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right)_0 = -\frac{1}{2r_0h}\varphi_3 + \frac{1}{2r_0h}\varphi_4 + O(h^2) \end{cases}$$

截断误差 $O(h^2)$ 与 h^2 同阶。



忽略 $O(h^2)$ 以下的小量,代入泊松方程,相应的五点差分公式

$$C_1\varphi_1 + C_2\varphi_2 + C_3\varphi_3 + C_4\varphi_4 - C_0\varphi_0 = -\rho/\varepsilon$$

其中

$$\begin{cases} C_1 = C_2 = \frac{1}{h^2} \\ C_3 = \frac{1}{h^2} - \frac{\alpha}{2r_0h} \\ C_4 = \frac{1}{h^2} + \frac{\alpha}{2r_0h} \\ C_0 = C_1 + C_2 + C_3 + C_4 = \frac{4}{h^2} \end{cases}$$

当 $\alpha = 1$ 时,得旋转对称静电场正方形网格的五点差分公式

$$\varphi_1 + \varphi_2 + (1 - \frac{h}{2r_0})\varphi_3 + (1 + \frac{h}{2r_0})\varphi_4 - 4\varphi_0 = -h^2\rho/\varepsilon$$

当 $\alpha = 0$ 时,得平面静电场正方形网格的五点差分公式

$$\varphi_1 + \varphi_2 + \varphi_3 + \varphi_4 - 4\varphi_0 = -h^2\rho/\varepsilon$$

对于 $\rho = 0$ 的平面,拉普拉斯方程的五点差分公式为(用正方形网格离散时,电位是相邻四点电位的平均值.)

$$\varphi_1 + \varphi_2 + \varphi_3 + \varphi_4 - 4\varphi_0 = 0$$

$$\varphi_0 = \frac{1}{4}(\varphi_1 + \varphi_2 + \varphi_3 + \varphi_4)$$



Helmholtz方程的差分格式

椭圆微分方程的Helmholtz方程

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial^2 u(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x,y)}{\partial y^2} + g(x,y)u(x,y) = f(x,y) \\ (x_0 \leq x \leq x_f, y_0 \leq y \leq y_f) \\ u(x_0, y) = b_{x0}(y), u(x_f, y) = b_{xf}(y) \\ u(x, y_0) = b_{y0}(x), u(x, y_f) = b_{yf}(x) \end{array} \right.$$

首先空间网格化

$$x_i = x_0 + i\Delta x, \quad y_i = y_0 + j\Delta y,$$

$$\Delta x = (x_f - x_0)/M_x, \quad \Delta y = (y_f - y_0)/M_y$$

M_x, M_y 分别是 x, y 方向的网格数。



差分格式

上式的微分方程式的差分形式

$$\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta y^2} + g_{i,j}u_{i,j} = f_{i,j}$$

整理得

$$\begin{cases} u_{i,j} = r_x(u_{i+1,j} + u_{i-1,j}) + r_y(u_{i,j+1} + u_{i,j-1}) + r_{xy}(g_{i,j}u_{i,j} - f_{i,j}) \\ u_{0,i} = b_{x0}(y_i), u_{M_x,i} = b_{xf}(y_i) \\ u_{i,0} = b_{y0}(x_i), u_{i,M_y} = b_{yf}(x_i) \end{cases}$$

$$r_x = \frac{\Delta x^2}{2(\Delta x^2 + \Delta y^2)}, r_y = \frac{\Delta y^2}{2(\Delta x^2 + \Delta y^2)}, r_{xy} = \frac{\Delta x^2 \Delta y^2}{2(\Delta x^2 + \Delta y^2)}$$



二维泊松方程和Laplace方程

1. 当 $g(x, y) = 0$, 椭圆微分方程Helmholtz方程变为泊松方程, 如果 x, y 两个方向的空间步长相等, $\Delta x = \Delta y = h$, 则得差分公式

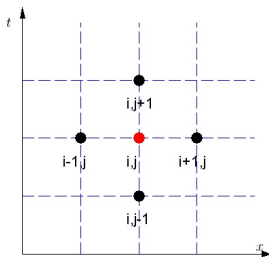
$$\left\{ \begin{array}{l} u_{i,j} = \frac{1}{4}[(u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1}) - h^2 f_{i,j}] \\ u_{0,i} = b_{x0}(y_i), u_{n,i} = b_{xf}(y_i) \\ u_{i,0} = b_{y0}(x_i), u_{i,m} = b_{yf}(x_i) \\ (i = 1, 2, \dots, n-1, j = 1, 2, \dots, m-1) \end{array} \right.$$

2. 对于 $g(x, y) = 0, f(x, y) = 0$, 方程变为Laplace方程, 每一个格点值只与周围4个最近格点值有关

$$u_{ij} = \frac{1}{4}(u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1})$$

此方程的求解方法通常是对于给定边界节点值, 求解代数方程组得到区域内的节点值。更为普遍的是为了加快收敛的迭代速度常采用超松弛迭代(SOR)。





- ① 对Helmholtz方程, 取 $g(x, y) = \sqrt{x}$, $f(x, y) = x^2 + y^2$, 数值求解分布函数 $u(x, y)$. 边界条件为

$$\begin{cases} u_{0,y} = y^2, u_{4,y} = 16\cos(y) \\ u(x, 0) = x^2, u_{x,4} = 16\cos(x) \end{cases}$$

- ② 一个加热的铝平板四边分别保持恒定温度 100°C , 0°C , 75°C , 50°C , 根据Laplace的差分格式求温度分布。



三维拉普拉斯方程和泊松方程的差分格式

在直角坐标系下，三维空间的泊松方程可写为

$$\nabla^2 \varphi = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = -\rho/\varepsilon$$

当 $\rho = 0$ 时, 上述方程为拉普拉斯方程。

为推导上述方程在三维空间等间距七点差分公式，需将空间任意点的电位 $\varphi_0(x_0, y_0, z_0)$ 用周围相邻网格点的电位来表示。对于等间距网格，将相邻点电位按泰勒级数展开可得

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi_1 = \varphi_0 - \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)_0 h + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}\right)_0 h^2 - \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 \varphi}{\partial x^3}\right)_0 h^3 + \dots \\ \varphi_2 = \varphi_0 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)_0 h + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}\right)_0 h^2 + \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 \varphi}{\partial x^3}\right)_0 h^3 + \dots \\ \varphi_3 = \varphi_0 - \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y}\right)_0 h + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2}\right)_0 h^2 - \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 \varphi}{\partial y^3}\right)_0 h^3 + \dots \\ \varphi_4 = \varphi_0 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y}\right)_0 h + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2}\right)_0 h^2 + \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 \varphi}{\partial y^3}\right)_0 h^3 + \dots \\ \varphi_5 = \varphi_0 - \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z}\right)_0 h + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2}\right)_0 h^2 - \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 \varphi}{\partial z^3}\right)_0 h^3 + \dots \\ \varphi_6 = \varphi_0 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z}\right)_0 h + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2}\right)_0 h^2 + \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 \varphi}{\partial z^3}\right)_0 h^3 + \dots \end{array} \right.$$



式中 h 是在 x, y, z 3个方向上的网格长度, 而

$$\begin{cases} \varphi_1 = \varphi(x_0 - h, y_0, z_0), \\ \varphi_2 = \varphi(x_0 + h, y_0, z_0), \\ \varphi_3 = \varphi(x_0, y_0 - h, z_0), \\ \varphi_4 = \varphi(x_0, y_0 + h, z_0), \\ \varphi_5 = \varphi(x_0, y_0, z_0 - h), \\ \varphi_6 = \varphi(x_0, y_0, z_0 + h) \end{cases}$$

得

$$\begin{cases} (\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2})_0 = \frac{1}{h^2} \varphi_1 + \frac{1}{h^2} \varphi_2 - \frac{2}{h^2} \varphi_0 + O(h^2), \\ (\frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2})_0 = \frac{1}{h^2} \varphi_3 + \frac{1}{h^2} \varphi_4 - \frac{2}{h^2} \varphi_0 + O(h^2), \\ (\frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2})_0 = \frac{1}{h^2} \varphi_5 + \frac{1}{h^2} \varphi_6 - \frac{2}{h^2} \varphi_0 + O(h^2), \end{cases}$$

将上式代入泊松方程并略去高阶小量得直角坐标系中等间距的三维泊松方程的七点差分公式为



Continued

$$C_1\varphi_1 + C_2\varphi_2 + C_3\varphi_3 + C_4\varphi_4 + C_5\varphi_5 + C_6\varphi_6 = C_0\varphi_0 - \rho/\varepsilon$$

式中

$$\begin{cases} C_1 = C_2 = C_3 = C_4 = C_5 = C_6 = \frac{1}{h^2} \\ C_0 = C_1 + C_2 + C_3 + C_4 + C_5 + C_6 = \frac{6}{h^2}. \end{cases}$$

在圆柱坐标系中，三维空间的泊松方程为

$$\nabla^2\varphi = \frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial\varphi}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial\theta^2} = -\rho/\varepsilon$$

当 $\rho = 0$ 时，上述方程便为三维拉普拉斯方程。

为求相应的差分公式，假定在圆柱坐标中取等间距网格 $\Delta z = h$, $\Delta r = k$, $\Delta\theta = \tau$, 则将 φ 在空间中任一点 (z_0, r_0, θ_0) 按泰勒级数展开：



$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi(z_0 - h, r_0, \theta_0) = \varphi_1 = \varphi_0 - \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z}\right)_0 h + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2}\right)_0 h^2 - \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 \varphi}{\partial z^3}\right)_0 h^3 + \dots \\ \varphi(z_0 + h, r_0, \theta_0) = \varphi_2 = \varphi_0 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z}\right)_0 h + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2}\right)_0 h^2 + \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 \varphi}{\partial z^3}\right)_0 h^3 + \dots \\ \varphi(z_0, r_0 - k, \theta_0) = \varphi_3 = \varphi_0 - \left(\frac{\partial \varphi}{\partial r}\right)_0 h + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial r^2}\right)_0 h^2 - \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 \varphi}{\partial r^3}\right)_0 h^3 + \dots \\ \varphi(z_0, r_0 + k, \theta_0) = \varphi_4 = \varphi_0 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y}\right)_0 h + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2}\right)_0 h^2 + \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 \varphi}{\partial y^3}\right)_0 h^3 + \dots \\ \varphi(z_0, r_0, \theta_0 + \tau) = \varphi_5 = \varphi_0 - \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z}\right)_0 h + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2}\right)_0 h^2 - \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 \varphi}{\partial z^3}\right)_0 h^3 + \dots \\ \varphi(z_0, r_0, \theta_0 - \tau) = \varphi_6 = \varphi_0 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z}\right)_0 h + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2}\right)_0 h^2 + \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 \varphi}{\partial z^3}\right)_0 h^3 + \dots \end{array} \right.$$

由上式得

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2}\right)_0 = \frac{1}{h^2} \varphi_1 + \frac{1}{h^2} \varphi_2 - \frac{2}{h^2} \varphi_0 + O(h^2), \\ \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial r^2}\right)_0 = \frac{1}{k^2} \varphi_3 + \frac{1}{k^2} \varphi_4 - \frac{2}{k^2} \varphi_0 + O(h^2), \\ \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial r}\right)_0 = \frac{1}{2r_0 k} \varphi_3 + \frac{1}{2r_0 k} \varphi_4 + O(k^2), \\ \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \theta^2}\right)_0 = \frac{1}{r_0^2 \tau^2} \varphi_5 + \frac{1}{r_0^2 \tau^2} \varphi_6 - \frac{2}{r_0^2 \tau^2} \varphi_0 + O(\tau^2), \end{array} \right.$$

式中 $O(h^2)$, $O(k^2)$, $O(\tau^2)$ 为分别与 h^2 , k^2 , τ^2 同阶的小量。



忽略高阶小量，代入泊松方程，即可得圆柱坐标系中三维泊松方程的七点差分公式

$$C_1\varphi_1 + C_2\varphi_2 + C_3\varphi_3 + C_4\varphi_4 + C_5\varphi_5 + C_6\varphi_6 = C_0\varphi_0 - \rho/\varepsilon$$

式中

$$\left\{ \begin{array}{l} C_1 = C_2 = \frac{1}{h^2} \\ C_3 = \frac{1}{k^2} \left(1 - \frac{k}{2r_0}\right) \\ C_4 = \frac{1}{k^2} \left(1 + \frac{k}{2r_0}\right) \\ C_5 = C_6 = \frac{1}{r_0^2 \tau^2} \\ C_0 = C_1 + C_2 + C_3 + C_4 + C_5 + C_6 \\ \quad = \frac{2}{h^2} + \frac{2}{k^2} + \frac{2}{r_0^2 \tau^2} \end{array} \right.$$

通过上述差分公式，将电位满足的微分方程变成了线性代数方程，并把区域中任意点的电位与其周围相邻点的电位联系起来，区域内任一个节点都可以写出类似的线性方程，方程中 $C_0, C_1, C_2, C_3, C_4, C_5, C_6$ 是决定于步长的已知系数，而 $\varphi_0, \varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \varphi_4, \varphi_5, \varphi_6$ ，则是待求的未知量。



邻近边界节点的内节点差分方程中，将包含有边界电位值，而这是已知量。区域内有 n 个内节点时，就建立了 n 个差分方程，从而形成 n 元线性代数方程组，可写成如下形式：

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} \varphi_j = b_i, i = 1, 2, \dots, n, \text{ or } A \cdot \varphi = B$$

式中 A 为线性代数方程的系数矩阵； B 为方程式右端向量，由边界条件给定的电位公布和空间电荷密度分布函数决定； φ 为待定的未知量。求解上述线性代数方程组，可得到区域内节点上的电位值。在具体求解过程中，还需要对边界条件进行差分离散处理。

1. 由于场域被网格划分后，边界不一定都落在等间距网格节点上，常将最靠近场域边界的节点取成相应的边界的近似点。2. 在边界附近采用不等距差分公式处理边界条件的离散问题。3. 对于存在第二类或第三类边界条件的边值问题，用差商代替微商对边界条件作离散化处理。



差分方程的求解

为选择适当方法求解由泊松方程经过有限差分离散化后的线性代数方程组，尚需对方程组的系数矩阵 A 的性质有了解，其具有以下性质：

1. 矩阵 A 是稀疏矩阵，因为每一个内节点只与相邻节点的电位有关，系数 a_{ij} 中大部分为零，只有当 i 与 j 相邻时，系数 a_{ij} 才不为零。对于五点差分公式，系数矩阵每行的非零元素最多不超过5个，且分布在对角元两旁。
2. 矩阵 A 是对称、正定的，不仅对应元素 $a_{ij} = a_{ja}$ ，而且其所有前主子式(由前 i 行和前 j 列所组成的子矩阵的行列式，称为 i 阶前主子式)都大于零。
3. 矩阵 A 的阶数决定于离散化后网格的内节点数。为使数值解具有足够的精度，采用小的步长，节点数较大，因此系数矩阵 A 是高阶矩阵。
4. 常采用迭代方法：如同时位移迭代法，Gauss-Seidal和Successive Over-Relaxation.



同时位移迭代法

$$A \cdot \varphi = B \Rightarrow \varphi_i = \sum_{j=1, j \neq i}^n a_{ij} \varphi_j + b_i, i = 1, 2, \dots, n,$$

φ_i 表示第*i*个节点上的电位。用简单迭代法计算第*k* + 1次的迭代值为

$$\varphi_i^{(k+1)} = \sum_j a_{ij} \varphi_j^{(k)} + b_j$$

不论初值 $\varphi_i^{(0)}$ 如何选，当 $\rightarrow \infty$ 时， $\varphi_j^{(k)}$ 比收敛于差分问题的解。同时上式表示，计算第*k* + 1次的第*i*点的电位值时，所用相邻点的电位值，是前一次(*i.e.* 第*k*次)的电位值，因此必须等到第*k*次*n*个点的电位值全部计算完，才能用第*k*次的所有数据作第*k* + 1次的迭代计算，所以此方法称为同时位移迭代法。主要缺点：收敛速度慢和点用计算机内存单元多，因计算机必须分配两套内存单元来分别贮存两次迭代所得到的电位数据，限制了网格节点灵敏的增加。



高斯-赛德尔(Gauss-Seidal)迭代

进行某个节点的第 $k+1$ 次迭代计算时，某些相邻点的第 $k+1$ 次近似值已经算出，那么在计算中用这个新值代替旧值，此时，迭代公式变为

$$\varphi_i^{(k+1)} = \{b_i - \sum_{j<i} a_{ij}\varphi_j^{(k+1)} - \sum_{j>i} a_{ij}\varphi_j^{(k)}\}/a_{ii}$$

以五点网格为例，在 z 方向的迭代次序是从左到右，在 r 方向上从下到上，则高斯-赛德尔迭代公式为

$$\varphi_0^{(k+1)} = \frac{1}{C_0}(C_1\varphi_1^{(k+1)} + C_2\varphi_2^{(k)} + C_3\varphi_3^{(k+1)} + C_4\varphi_4^{(k)})$$

又称为逐次迭代法，可以加速迭代过程的收敛，又可节省计算机存储量。其残差定义为前后两次迭代过程中各点电位值的差值 $\varepsilon_i^{(k+1)} = \varphi_i^{(k+1)} - \varphi_i^{(k)}$ 。



逐次超松弛迭代法

可加快迭代收敛速度，将逐次迭代法所定义的第 $k+1$ 次残差乘以 ω 后再加第 k 次的电位值 $\varphi_i^{(k)}$ ，以此作为第 $k+1$ 次新的近似值 $\varphi_{i(\omega)}^{(k)}$ ，相应的公式为

$$\varphi_{i(\omega)}^{(k)} = (1 - \omega)\varphi_i^{(k)} + \omega\varphi_i^{(k+1)}$$

对于二维场为

$$\varphi_0(\omega)^{(k+1)} = (1 - \omega)\varphi_0^{(k)} + \frac{\omega}{C_0}(C_1\varphi_1^{(k+1)} + C_2\varphi_2^{(k)} + C_3\varphi_3^{(k+1)} + C_4\varphi_4^{(k)})$$

ω 称为迭代松弛因子，也称为阻尼因子，通常 $0 < \omega < 2$ ，满足关系 $1 \leq \omega < 2$ 时的 ω 称为超松弛因子。

三维空间为

$$\begin{aligned} \varphi_0(\omega)^{(k+1)} = & (1 - \omega)\varphi_0^{(k)} + \frac{\omega}{C_0}(C_1\varphi_1^{(k+1)} + C_2\varphi_2^{(k)} + C_3\varphi_3^{(k+1)} \\ & + C_4\varphi_4^{(k)} + C_5\varphi_5^{(k+1)} + C_6\varphi_6^{(k)}) \end{aligned}$$



超松弛因子的选取

迭代因子的选取是否适当，对收敛速度影响极大，其与网格形式、节点多少、迭代次序等因素有关，关于最佳迭代因子 ω_0 的确定，以残差 $\varepsilon_i^{(k+1)} = \varphi_i^{(k+1)} - \varphi_i^{(k)}$ 计算，则其绝对值的平均值为

$$\bar{\varepsilon}^{(k)} = \sum_i^N |\varphi_i^{(k)} - \varphi_i^{(k-1)}|/N$$

$$\bar{\varepsilon}^{(k+1)} = \sum_i^N |\varphi_i^{(k+1)} - \varphi_i^{(k)}|/N$$

设 $\lambda = \bar{\varepsilon}^{(k+1)}/\bar{\varepsilon}^{(k)}$, $\mu^2 = (\lambda + \omega^{(k)} - 1)^2/\lambda(\omega^{(k)})^2$, $\omega' = 2/(1 + \sqrt{1 - \mu^2})$, $\omega^{(k)}$ 为第 k 迭代时用的迭代因子。于是，第 $k + 1$ 次迭代时最佳超松弛迭代因子 ω_0 取为

$$\omega_0 = \omega' - \frac{1}{4}(2 - \omega')$$



迭代法中的误差估计

判别迭代法的误差通常有三种方法：一是判断相信两次迭代结果的绝对误差或最大相对误差，

$$\varepsilon^{(k)} = \max\{|\varphi_i^{(k+1)} - \varphi_i^{(k)}|\}, \varepsilon_{\max}^{(k)} = \max\left|1 - \frac{\varphi_i^{(k-1)}}{\varphi_i^{(k)}}\right|, i = 1, 2, \dots, n$$

另一种是判别n个节点的平均相对误差

$$\varepsilon^{(k)} = \sum_{i=1}^n |\varphi_i^{(k)} - \varphi_i^{(k-1)}| / \sum_{i=1}^n \varphi_i^{(k)}.$$

通常只以上述三种方法的一种作为判别迭代收敛的标准，当迭代过程中 $\varepsilon^{(k)}$ 小于给定的数值($10^{-6} - 10^{-8}$)即可终止迭代，得到差分方程的近似解。同时差分方程的迭代结果代替真实解时，差分方程包含了引进的截断误差，常需减小步长 h 。



非线性偏微分方程

伯格斯方程(Burgers equation, $u_t + uu_x = \nu u_{xx}$) 是一个模拟冲击波的传播和反射的非线性偏微分方程,

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

其中 ν 是扩散系数, 此方程含有扩散项 νu_{xx} 和非线性对流项 uu_x , 此方程为流体力学Navier-Stokes方程数值研究中的一个模型方程, 其较好的差分格式为

1. 跳点格式: 当 $j + n$ 为偶数时

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{r}{2}(f_{j+1}^n - f_{j-1}^n) + s(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n)$$

当 $j + n$ 为奇数时,

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{r}{2}(f_{j+1}^{n+1} - f_{j-1}^{n+1}) + s(u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1})$$



其中 $r = \Delta t / \Delta x$, $s = \nu \Delta t / \Delta x^2$, $f = u^2/2$ 。跳点是先用显式求 $n+1$ 时间层上的 $n+1+j$ 为奇数点的值 $u_j^{n+1}(I)$, 然后求 $n+1+j$ 为偶数点的值 $u_j^{n+1}(II)$, 形式上用隐式求。

2. 分裂型格式: Burgers方程可分裂为:

$$\begin{cases} \frac{1}{2}u_t + uu_x = 0 \\ \frac{1}{2}u_t - \nu x_{xx} = 0 \end{cases}$$

离散化, 设计接续格式。一种常用的全隐式分裂格式

$$\begin{aligned} \frac{u_j^{n+1/2} - u_j^n}{\Delta t} &= \frac{u_{j+1}^n + u_{j-1}^n}{2\Delta x} \left[\frac{1}{2}(u_{j+1}^{n+1/2} - u_{j-1}^{n+1/2}) + \frac{1}{2}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) \right] \\ \frac{u_j^{n+1} - u_j^{n+1/2}}{\Delta t} &= \frac{\nu}{2\Delta x^2} [(u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}) + \\ &\quad (u_{j+1}^{n+1/2} - 2u_j^{n+1/2} + u_{j-1}^{n+1/2})] \end{aligned}$$

此差分格式误差比较小, 但每步要解三对角方程组, 计算时间长。



KdV方程与孤立子的数值模拟

KdV方程在光纤通信中有重要应用

$$u_t + 6uu_x + u_{xxx} = 0,$$

uu_x 项是非线性对流项，会使波前变陡。 u_{xxx} 是色散项(i.e.不同波长波的传播速度不同)，两项平衡时，会使波传播时不会变形。三种差分格式：

1. 线上法

$$\frac{du_i}{dt} = -6u_i \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} - \frac{u_{i+2} - 2u_{i+1} + 2u_{i-1} - u_{i-2}}{\Delta x^3}$$

2. 蛙跳格式

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} = & u_j^{n-1} - \frac{2\Delta t}{\Delta x} [(u_{j+1}^n + u_j^n + u_{j-1}^n)(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n)] \\ & - \frac{\Delta t}{(\Delta x)^3} (u_{j+2}^n - 2u_{j+1}^n + 2u_{j-1}^n - u_{j-2}^n) \end{aligned}$$

截断误差为 $O(\Delta t^2 + \Delta x^2)$ 。



3. 跳点格式:

当 $j+n$ 为偶数时

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{3\Delta t}{\Delta x}(f_{j+1}^n - f_{j-1}^n) - \frac{\Delta t}{(\Delta x)^3}(u_{j+2}^n - 2u_{j+1}^n + 2u_{j-1}^n - u_{j-2}^n)$$

当 $j+n$ 为奇数时,

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{3\Delta t}{\Delta x}(f_{j+1}^{n+1} - f_{j-1}^{n+1}) + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^3}(u_{j+2}^n - 2u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1} - u_{j-2}^{n+1})$$

其中 $f = u^2/2$ 。

描述由恒定涡旋速度产生的温度场的对流问题的方程为

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla T = 0 \rightarrow \frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = 0$$



浅水波方程的数值解法

浅水波方程是关于扰动在水中或不可压缩流体中的传播问题，浅水是指假定水深与扰动范围比较小，方程可根据流体质量守恒和动量守恒方程得到，涉及的变量是流体的高度 h ，二维流体速度 u, v ，在适当的单位选择下，与质量成正比的量是 h ，与动量成正比的量是 uh, vh ，作用流体上的力是重力，浅水方程为

$$\begin{aligned}\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(uh)}{\partial x} + \frac{\partial(vh)}{\partial y} &= 0 \\ \frac{\partial(uh)}{\partial t} + \frac{\partial(u^2h + \frac{1}{2}gh^2)}{\partial x} + \frac{\partial(uvh)}{\partial y} &= 0 \\ \frac{\partial(vh)}{\partial t} + \frac{\partial(uvh)}{\partial y} + \frac{\partial(u^2h + \frac{1}{2}gh^2)}{\partial y} &= 0\end{aligned}$$

为使得得到偏微分方程组的紧凑形式，引进三个矢量：



$$U = \begin{pmatrix} h \\ uh \\ vh \end{pmatrix}, F(U) = \begin{pmatrix} uh \\ u^2h + \frac{1}{2}gh^2 \\ uvh \end{pmatrix}, G(U) = \begin{pmatrix} vh \\ uvh \\ v^2 + \frac{1}{2}gh^2 \end{pmatrix}$$

可写成

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} + \frac{\partial G(U)}{\partial y} = 0$$

此为守恒的双曲型偏微分方程, 当讨论一个方形区域, 并且规定一个反射边界, 在竖直边上设 $u=0$, 在水平边上设 $v=0$. 这些边界条件保证传播到边界的波反射回区域里. 采

用Lax-Wendroff差分格式数值求解上述方程, 每一个时间步分成两个半时间步, 第一个半时间步得到网格边上中点的值

$$\begin{aligned} U_{i+1/2,j}^{n+1/2} &= \frac{1}{2}(U_{i+1,j}^n + U_{i,j}^n) - \frac{\Delta t}{2\Delta x}(F_{i+1,j}^n - F_{i,j}^n) \\ U_{i,j+1/2}^{n+1/2} &= \frac{1}{2}(U_{i,j+1}^n + U_{i,j}^n) - \frac{\Delta t}{2\Delta y}(G_{i,j+1}^n - G_{i,j}^n) \end{aligned}$$



第二个半时间步：

$$U_{i,j}^{n+1} = U_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{i+1/2,j}^{n+1/2} - F_{i-1/2,j}^{n+1/2}) - \frac{\Delta t}{\Delta y} (G_{i,j+1/2}^{n+1/2} - G_{i,j-1/2}^{n+1/2})$$

特点：

- ① 初始在全部区域取 $h = 1, v = u = 0$, 所以解是静态的；
- ② 一段时间后，一个高斯型分布被加到 h 上，模拟一个像水滴落到水面上的脉冲扰动，最后波在整个区域四处传播；
- ③ Lax-Wendroff格式放大了人为的非物理的振荡，最终数值结果溢出。



流体方程数值解法

守恒形式的方程

$$\frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial f(s)}{\partial x} = 0$$

$$s = \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \\ s_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho(e + \frac{1}{2}u^2) \end{pmatrix}$$

$$f(s) = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(e + \frac{1}{2}u^2 + p) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_2 \\ s_2^2/s_1 + p \\ s_2(s_3 + p)/s_1 \end{pmatrix}$$

其中 u 是速度， p 是密度， e 是比内能， γ 是绝热指数。状态方程

$$e = \frac{p}{p(\gamma - 1)}$$

$$p = \rho e(\gamma - 1) = (\gamma - 1)(s_3 - \frac{s_3^2}{2s_1})$$



数值计算方法

① 采用两步的Lax-Wendroff差分格式

$$s_{n+1/2}^{k+1/2} = \frac{1}{2}(s_{n+1}^k + s_n^k) - \frac{\tau_k}{2h}[f(s_{n+1}^k) - f(s_n^k)], n = 0, 1, \dots, N-1$$

$$s_n^{k+1} = s_n^k - \frac{\tau_k}{h}[(s_{n+1/2}^{k+1/2} + s_n^k) - f(s_{n-1/2}^{k+1/2})] \\ + v(s_{n+1}^k - 2s_n^k + s_{n-1}^k), n = 0, 1, \dots, N-1$$

引进了人为的黏滞参数 v .

② 采用Godunov差分格式

$$\frac{s_{n+1/2}^{k+1} - s_{n+1/2}^k}{\tau_k} + \frac{f(s_{n+1}^k) - f(s_n^k)}{h} = 0, n = 0, 1, \dots, N-1$$

$$s_n^k = s(w(x_n, t_{k+1})), w(x_n, t_k) = w_{n-1/2}^k(x \leq x_n), \\ w_{n+1/2}^k(x \geq x_n), w = [\rho, up]$$



粘滞不可压缩流体

不可压缩流体的运动在很多自然现象中，流体的密度可以看作是不变的，因而运动过程中流体不能被压缩，也不能膨胀。于是流体的质量守恒等价于流体的体积守恒。这种运动被称为不可压缩流体的运动。其密度是常数，因而流体力学的方程组可以简化，流体运动的速度 u 和压力 p 满足下述方程：

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla)u = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\nabla^2 u \\ \nabla \cdot u = 0 \end{cases}$$

其中 $\nu = \frac{\mu}{\rho}$ 是运动粘性系数， μ 是动力学粘性系数。



作业1

- ① 对偏微分方程 $u_t = au_x$, 求采用下面差分格式的稳定性条件:

$$\frac{1}{\Delta t} [u_j^{k+1} - \frac{1}{2}(u_{j+1}^k + u_{j-1}^k)] = \frac{a}{2\Delta x} (u_{j+1}^k - u_{j-1}^k)$$

- ② 考虑边值问题

$$\begin{aligned} u_t &= au_{xx} \quad 0 < x < 1, t > 0, \\ u_x(0, t) &= 0, u(1, t) = 1, \\ u(x, 0) &= x \end{aligned}$$

如果取 $\Delta x = \frac{2}{7}, x_i = (j - 0.5)\Delta x, j = 1, 2, 3, \Delta t = \frac{8}{49}, t_k = k\Delta t$, 求出 u_1^1, u_2^1, u_3^1 .



作业2

- ① 求下列热传导方程的数值解：

$$\begin{cases} u_t = au_{xx}, 0 \leq x \leq x_f, 0 \leq t \leq t_f \\ u(0, t) = b_0(t), u(x_f, t) = b_{x_f}(t) \\ u(x, 0) = u_0(x) \end{cases}$$

- ② 求解Laplace方程 $u_{xx} + u_{yy} = 0$, 边界是 x 轴, y 轴和直线 $x + y = 1$, 边界条件是 $u(x, y) = x^2 + y^2$;
取 $\Delta x = \Delta y = h = 1/4$, 采用有限差分方法求三个内点 $u_{1,1}$, $u_{2,1}$, $u_{1,2}$ 的值。
- ③ 用泰勒展开求 $u_t + u_x = u^2$ 的显式差分格式。



PDE toolbox

双曲型(hyperbolic)方程:

$$d \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \nabla \cdot (c \nabla u) + au = f$$

抛物线型(parabolic)方程:

$$d \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (c \nabla u) + au = f$$

椭圆形(elliptic)方程:

$$-\nabla \cdot (c \nabla u) + au = f$$

特征(eigen)值问题(λ 为未知特征值):

$$-\nabla \cdot (c \nabla u) + au = \lambda u$$

其中 ∇ 为向量微分算符, a, b, c, d, f 和未知函数 u 均是 Ω 上的实函数, 对于抛物线型和双曲线型方程, a, b, c, d, f 可以包含时间 t , 函数 u 以及函数 u 的梯度, 也可处理方程组。



边界

- 狄利克莱(Dirichlet)边界条件, 给出了函数 u 在边界上的取值:

$$hu = r$$

h 和 r 是空间(x 和 y)、函数 u 以及时间 t 的函数。

- 诺依曼(Neumann)边界条件, 给出了函数 u 的变化率在边界上的情况

$$n \cdot (c \nabla u) + qu = g$$

n 向量表示边界向外的法线方向。 q, g 是是空间(x 和 y)、函数 u 以及时间 t 的函数。

- 混合边界条件, 同时存在前面两种边界(针对方程组情况)

