高维数学物理问题的分数步方法

袁益让 著

科 学 出 版 社

高维数学物理问题的分数步方法

袁益让　著

科学出版社

北　京

内 容 简 介

本书主要研究分数步方法在求解多变量数学物理问题中的应用及其数值分析. 前四章是基础理论部分, 包括: 对流-扩散问题分数步数值方法基础、双曲型方程的交替方向有限元法、抛物型问题的交替方向有限元方法和二阶椭圆问题的混合元交替方向法; 后三章是实际应用部分, 包括: 二相渗流驱动问题的分数步方法、多层渗流耦合问题的分数步方法和渗流力学数值模拟中的交替方向有限元方法.

本书可作为信息和计算科学、数学和应用数学、计算物理、物理化学、计算机软件、计算流体力学、石油勘探与开发、半导体器件、环保等专业的高年级本科生参考书与研究生教材, 也可供相关领域的教师、科研人员和工程技术人员参考.

图书在版编目(CIP)数据

高维数学物理问题的分数步方法/袁益让著. —北京: 科学出版社, 2015.6

ISBN 978-7-03-044731-9

Ⅰ. ①高… Ⅱ. ①袁… Ⅲ. ①数学物理方程-数值方法 Ⅳ. ①O175.24

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015) 第 124360 号

责任编辑: 王丽平 / 责任校对: 钟 洋

责任印制: 肖 兴 / 封面设计: 陈 敬

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码: 100717

http://www.sciencep.com

北京彩虹伟业印刷有限公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2015 年 6 月第 一 版 开本: 720 × 1000 1/16

2015 年 6 月第一次印刷 印张: 34 1/2

字数: 700 000

定价: 178.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

前 言

在能源、环境、半导体器件数值模拟等科学和技术领域, 其数学模型是一类高维对流–扩散非线性偏微分方程组的初边值问题, 对这类大规模科学和工程计算来说, 其计算节点通常可达数万甚至数千万个. 数值模拟时间有的长达数年、数十年, 甚至数千万年, 需要分数步方法来解决这类实际计算问题. 这类方法的基础是 Peaceman, Rachford 和 Douglas 在 1955 年的工作, 随后美国和前苏联的数学家 (Douglas, Dupont, Fernandes, Fairweather, Hayes, Rachford, Baker, Oliphant, Bagrinovskii, Samarckii, Yanenko 等) 的工作拓广和改进了这一方法, 从传统的差分方法拓广到有限元方法等众多领域.

分数步方法——交替方向法最早应用于有限差分方法, 交替方向法最大的优点在于它将高维问题转化为一系列的一维问题来求解, 可以认为计算规模在剖分不变的情况下, 实际计算工作量从 $O(h^{-d})$ 降至 $O(dh^{-1})$, 极大地减少了工作量, 大大提高了计算效率, 因此很快在大规模科学和工程计算中得到应用和推广.

作者于 1985~1988 年在美国芝加哥大学数学系、明尼苏达大学美国国家应用数学研究所和怀俄明大学美国国家石油工程数学研究所访问和工作期间, 在导师 J.Douglas Jr 的指导下, 系统地学习和研究了能源数值模拟、分数步方法等领域的理论、应用和软件开发等方面的工作. 在分数步方法领域主要系统学习和研究了 Douglas, Dupont, Yanenko, Samarckii 等美国和前苏联学派的重要工作. 实际上分数步技术已成为能源数值模拟的重要组成部分. 国内外一些著名的能源数值模拟软件系统都采用了这项技术. 1988 年作者回国后带领课题组继续从事这一领域的理论研究、软件开发和生产实际应用等领域的科研工作, 先后承担了国家 “973” 计划、攀登计划 (A、B)、国家自然科学基金 (数学、力学)、国家教委博士点基金、国家攻关及中国石油天然气总公司和中国石油石化总公司的攻关课题, 本书共分 7 章, 前 4 章是基础理论部分, 后 3 章是实际应用部分, 是山东大学计算数学学科三十多年来在这一领域研究工作总结.

第 1 章对流–扩散问题分数步数值方法基础. 分数步方法是为满足数值计算中实际需要出现的, 即利用它构造简单的经济格式来求解数学物理中多变量的复杂问题, 这方面的基础是 Peaceman, Rachford 和 Douglas(1955 年) 的工作. 一些美国和前苏联的数学家的工作拓广和改进了这方面的工作. 分数步方法是构造解数学物理中多变量复杂的问题的主要方法之一, 它不仅可以作为构造最优算法的工具, 而且还可作为研究差分和微分方程理论的一种手段. 该章是本书最基础的部分, 它是能

源数学的基础理论, 其次介绍美国 Douglas 学派和前苏联 Yanenko 学派关于求解抛物型方程的分数步简单格式及 Fourier 分析最基础的工作, 最后介绍 Lees 借助能量估计的办法对任意域中的非线性抛物型方程使用交替方向法的收敛性分析.

第 2 章双曲型方程的交替方向有限元方法. 在油气田勘探工作中, 人工地震是一种很重要的方法, 因为它不仅可以提供沉积覆盖地区有关地下地质、地层、岩性等方面的信息, 而且工作效率极高, 该问题的数学模型体现为对非线性双曲型方程的研究. 现代地震勘探正进一步向高信噪比、高分辨率、高保真度、高精度方向发展, 由于其复杂性, 需在理论、方法和应用问题上进行深入的探索. J.Douglas Jr 和 T.Dupont 于 1971 年针对非线性抛物方程和二阶双曲方程提出了交替方向有限元格式. 我们对一般线性和非线性双曲问题作了系列的深入研究. 该章将重点介绍线性和非线性双曲型方程和方程组有限元方法的收敛性和稳定性、非线性双曲型方程组的交替方向有限元方法、线性和非线性双曲问题一类新型交替方向有限元方程方法及其数值分析, 最后讨论了非矩形区域上非线性双曲型方程交替方向有限元方法.

第 3 章抛物型问题的交替方向有限元方法. 20 世纪 70 年代 Douglas 和 Dupont 将交替方向法和有限元法相结合, 率先提出交替方向有限元方法, 交替方向有限元方法同时具备了交替方向法化高维为低维, 大大缩减工作量和有限元高精度的特点, 具有重大的应用价值. 我们深入研究了与能源和环境科学息息相关的对流–扩散问题的交替方向有限元方法. 该章重点介绍对流–扩散问题的特征修正交替方向变网格有限元方法、对流占优抛物型积分–微分方程交替方向特征有限元方法、非矩形区域上非线性抛物型方程组的交替方向有限元方法和对流扩散方程的多步 Galerkin 交替方向预处理迭代解法.

第 4 章二阶椭圆问题的混合元交替方向法. 对于能源和半导体器件的数值模拟, 混合元方法具有明显的优点, 有着重要的实用价值, 近年来在工程实际计算中得到了广泛的应用. 但在混合元求解时, 得到的代数方程组较传统方法 (有限元方法、有限差分方法) 更加庞大, 解方程组也更为复杂, 因此, 人们试图在解方程组时引入交替方向迭代解法. J.Douglas Jr 和他的学生 D.C.Brourn 率先对二阶椭圆方程提出了两类交替方向格式, 即 Uzawa 格式和 Arrow-Hurwitz 格式, 随后对这两种格式作了进一步研究, 并做了大量的数值计算实验, 结果表明, 这一方法是可行的、有效的. 我们也作了一些研究. 目前正在开展关于二相渗流驱动问题和半导体器件瞬态问题交替方向混合元方法的理论和应用方面的研究. 该章重点介绍混合元 R-T 格式, R-T-N 格式和 B-D-M 格式, 二维 Uzawa、Arrow-Hurwitz 交替方向混合元迭代格式, 三维 Uzawa、Arrow-Hurwitz 交替方向混合元迭代格式, 以及 Arrow-Hurwitz 交替方向混合元迭代格式的稳定性和收敛性分析.

第 5 章二相渗流驱动问题的分数步方法. 地下石油渗流中油水二相渗流驱动

问题是能源数学的基础. J.Douglas Jr 等提出二维可压缩二相渗流问题的“微小压缩”数学模型、数值方法和分析, 开创现代数值模拟这一新领域. 在现代油田勘探和开发数值模拟计算中, 要计算的是大规模、大范围, 甚至是超长时间的, 需要分数步新技术才能完整解决问题. 我们对这一领域进行了系统深入的研究并成功应用到油田开发、油气盆地资源评估和勘探、海水入侵及防治工程、化学采油、半导体器件等众多领域的数值模拟. 该章将重点介绍二相渗流的分数步 (特征、迎风) 差分方法、多组分和动边值问题的分数步方法, 最后讨论半导体瞬态问题的分数步差分方法.

第 6 章多层渗流耦合问题的分数步方法. 三维油气资源盆地数值模拟问题的数学模型是一组具有活动边界的非线性偏微分方程组的初边值问题. 问题具有非线性、大区域、动边界、超长时间模拟的特点, 给构造数值方法和设计计算机软件达到工业化应用的要求, 带来极大的难度. 我们采用现代迎风、特征、分数步、残量和并行数值计算方法和技术, 并建立严谨的收敛性理论, 使数值模拟计算和工业应用软件建立在坚实的数学和力学基础上. 我们在国内外率先研制成三维油气资源评价和多层油资源运移聚集软件系统. 并已成功应用到胜利油田、辽河油田、冀东油田、大港油田和中原油田、得到了很好的实际效果, 成功地解决了这一著名问题. 该章重点讨论多层渗流耦合系统线性和非线性迎风分数步差分方法、特征分数步差分方法和动边值问题的分数步差分方法.

第 7 章渗流力学数值模拟中的交替方向有限元方法. 近年来石油科学在油气田勘探和开发的研究中取得重大进展. 在油田开发中重点对地下石油渗流中油水两相渗流驱动问题数值模拟的研究具有重要的理论和实用价值. 在油气资源的勘探和评估中, 发展迅速的油气资源盆地数值模拟, 成为地下石油渗流急需研究的另一重点课题. 我们在第 5 章和第 6 章重点研究和讨论该领域的分数步差分方法, 在第 7 章重点研究和讨论该领域的交替方向有限元方法. 在这里重点介绍油藏数值模拟的特征交替方向有限元方法、特征交替方向变网格有限元方法、盆地数值模拟中修正交替方向有限元法和半导体器件瞬态问题数值模拟中的变网格交替方向有限元方法.

高维数学物理问题的分数步方法作为能源数值模拟中的关键技术和方法, 在能源数值模拟的基础理论方面, 我们先后获得 1995 年国家光华科技基金三等奖, 2003 年教育部提名国家科学技术奖 (自然科学) 一等奖 —— 能源数值模拟的理论和应用, 1997 年国家教委科技进步奖 (甲类自然科学) 二等奖 —— 油水资源数值方法的理论和应用, 1993 年国家教委科技进步奖 (甲类自然科学) 二等奖 —— 能源数值模拟的理论方法和应用, 1989 年国家教委科技进步奖 (甲类自然科学) 二等奖 —— 有限元方法及其在工程技术中的应用, 1993 年由于培养研究生的突出成果 ——“面向经济建设主战场探索培养高层次数学人才的新途径” 获国家级优秀教

学成果一等奖.

在应用技术方面, 2010 年获国家科技进步奖特等奖 (2010-J-210-0-1-007)——大庆油田高含水后期 4000 万吨以上持续稳产高效勘探开发技术, 1995 年获山东省科技进步奖一等奖 —— 三维盆地模拟系统, 2003 年获山东省科技进步奖三等奖 —— 油资源二次运移聚集并行处理区域化精细数值模拟技术研究, 1997 年获国家水利部科技进步奖三等奖 —— 防治海水入侵主要工程后效及调控模式研究. 同时多次获山东大学、胜利石油管理局科技进步一等奖.

本书主要内容作者曾先后在国家自然科学基金委主办的暑期数学学校 —— 山东大学 (威海)、云南大学 (昆明) 和中国工业与应用数学学会讲习班 (西安交通大学) 作过系统报告.

在能源数值模拟计算方法 (包含分数步法) 的理论和应用课题的研究中, 在数学、渗流力学方面我们始终得到 J.Douglas Jr、R.E.Ewing、姜礼尚教授、石钟慈院士、林群院士、符鸿源研究员的指导、帮助和支持; 在计算渗流力学和石油地质方面得到郭尚平院士、汪集旸院士、徐世浙院士、秦同洛教授和胜利油田总地质师潘元林、胜利油田地科院总地质师王捷的指导、帮助和支持, 并一直得到山东大学, 胜利、大庆、长庆等石油管理局和山东省农业委员会有关领导的大力支持, 特在此表示深深的谢意! 本书在出版过程中曾得到国家自然科学基金 (批准号: 11271231) 和国家科技重大专项课题 (批准号: 2011ZX05011-004, 2011ZX05052) 的部分资助.

在本课题长达三十多年的研究过程中, 山东大学先后参加此项攻关课题的有我的学生王文洽教授, 羊丹平、梁栋、芮洪兴、鲁统超、赵卫东、程爱杰、崔明荣、杜宁和李长峰等博士, 他们为此付出了辛勤的劳动!

袁益让

2013 年 10 月于山东大学 (济南)

目　　录

第 1 章　对流–扩散问题分数步数值方法基础 ······ 1
1.1　对流–扩散问题的特征差分方法和有限元方法 ······ 1
1.1.1　模型问题及其特征有限元方法 ······ 1
1.1.2　特征有限元格式的误差估计 ······ 4
1.1.3　基于线性插值的特征差分方法 ······ 9
1.1.4　基于二次插值的特征差分方法 ······ 13
1.1.5　拓广和应用 ······ 15
1.2　求解抛物型方程的分数步简单格式及 Fourier 分析 ······ 17
1.2.1　纵横追赶格式 ······ 17
1.2.2　稳定化校正格式 ······ 21
1.2.3　解无混合导数的热传导方程的分解格式 ······ 22
1.2.4　解有混合导数的热传导方程的分解格式 ······ 24
1.2.5　算子的近似因子分解格式 ······ 26
1.2.6　预估–校正格式 ······ 28
1.2.7　非齐次边界条件情形下过渡层边值的取法 ······ 30
1.3　解多维抛物型方程的经济格式及能量模分析 ······ 31
1.3.1　原始问题及差分格式 ······ 31
1.3.2　Douglas-Rachford 交替方向法的稳定性 ······ 33
1.3.3　Peaceman-Rachford 交替方向法的稳定性 ······ 38
1.4　经济格式与因子化格式的等价性 ······ 41
参考文献 ······ 45
第 2 章　双曲型方程的交替方向有限元方法 ······ 47
2.1　双曲型方程有限元方法的稳定性和收敛性 ······ 49
2.1.1　关于连续时间的有限元逼近 ······ 50
2.1.2　关于离散时间的有限元逼近 ······ 53
2.2　非线性双曲型方程有限元方法及其理论分析 ······ 65
2.2.1　问题 I 的有限元逼近 ······ 68
2.2.2　问题 II 、III的有限元逼近 ······ 76
2.3　非线性双曲型方程组的稳定性和收敛性 ······ 77
2.3.1　格式 I 的理论分析 ······ 80

2.3.2 格式Ⅱ的理论分析 ······ 87
2.4 非线性双曲型方程组的交替方向有限元方法 ······ 92
2.4.1 预备知识 ······ 93
2.4.2 交替方向的 Galerkin 格式 ······ 94
2.4.3 误差分析 ······ 96
2.5 线性双曲型方程的一类新型交替方向有限元方法 ······ 101
2.5.1 预备知识 ······ 102
2.5.2 一类新的交替方向有限元格式 ······ 103
2.5.3 误差估计 ······ 104
2.6 二维拟线性双曲型方程交替方向有限元一类新方法 ······ 113
2.6.1 记号与假设 ······ 114
2.6.2 Galerkin 交替方向法的提出 ······ 116
2.6.3 H^1 模误差估计 ······ 117
2.6.4 L^2 模误差估计 ······ 122
2.6.5 交替方向有限元格式的矩阵实现 ······ 128
2.6.6 数值算例 ······ 129
2.7 三维拟线性双曲型方程交替方向有限元一类新方法 ······ 131
2.7.1 记号与假设 ······ 131
2.7.2 Galerkin 交替方向法的提出 ······ 132
2.7.3 H^1 模误差估计 ······ 133
2.7.4 L^2 模误差估计 ······ 135
2.7.5 交替方向有限元格式的矩阵实现 ······ 138
2.7.6 数值算例 ······ 139
2.8 一类三维非线性双曲型方程交替方向有限元方法 ······ 140
2.8.1 记号与假设 ······ 141
2.8.2 Galerkin 交替方向法的提出 ······ 143
2.8.3 H^1 模误差估计 ······ 144
2.8.4 L^2 模误差估计 ······ 153
2.8.5 数值算例 ······ 161
2.9 非矩形域上非线性双曲型方程交替方向有限元方法 ······ 163
2.9.1 记号与假设 ······ 163
2.9.2 Galerkin 交替方向法的提出 ······ 165
2.9.3 矩阵形式 ······ 167
2.9.4 三层格式的先验误差估计 ······ 168
2.9.5 四层格式的先验误差估计 ······ 172

参考文献 ······ 173
第 3 章　抛物型问题的交替方向有限元方法 ······ 176
3.1　对流扩散方程的交替方向有限元方法 ······ 177
3.1.1　系数可分离的对流扩散方程的交替方向特征有限元方法 ······ 177
3.1.2　一般系数的对流扩散方程的交替方向特征有限元方法 ······ 183
3.2　对流扩散问题的特征修正交替方向变网格有限元方法 ······ 188
3.2.1　引言 ······ 188
3.2.2　特征修正交替方向变网格有限元格式 ······ 189
3.2.3　收敛性分析 ······ 193
3.2.4　应用 ······ 203
3.3　对流占优抛物型积分–微分方程的交替方向特征有限元方法 ······ 206
3.3.1　方程模型及特征有限元数值分析 ······ 206
3.3.2　交替方向特征有限元数值分析 ······ 214
3.4　非矩形区域上非线性抛物型方程组的交替方向有限元方法 ······ 217
3.4.1　引言 ······ 218
3.4.2　抛物型微分方程组的算子分裂格式及误差估计 ······ 219
3.4.3　抛物型积分–微分方程组的算子分裂格式及误差估计 ······ 226
3.4.4　初始值的选取 ······ 232
3.5　对流扩散型方程的多步 Galerkin 格式的交替方向预处理迭代解法 ······ 233
3.5.1　预备知识 ······ 234
3.5.2　三维非线性对流扩散问题多步 Galerkin 格式的 ADPI 解法 ······ 235
3.5.3　对流占优扩散问题的沿特征方向多步离散 Galerkin 法的 ADPI 解法 ······ 242
3.5.4　初始启动格式 ······ 249
3.5.5　算法的拟优工作量估计与比较 ······ 249
参考文献 ······ 249
第 4 章　二阶椭圆问题的混合元交替方向法 ······ 253
4.1　Poisson 方程的混合有限元 Raviart-Thomas 格式 ······ 253
4.1.1　引言 ······ 254
4.1.2　混合元模型 ······ 254
4.1.3　三角形混合元 ······ 257
4.1.4　误差估计 ······ 263
4.1.5　四边形混合元 ······ 269
4.2　二阶椭圆问题新的混合元格式 ······ 270
4.2.1　关于 R-T-N 元和 B-D-M 元的描述 ······ 270

4.2.2 一个简单模型问题的应用 …… 272
4.2.3 渐近误差估计 …… 273
4.3 二维混合元交替方向迭代方法 …… 275
4.3.1 引言 …… 275
4.3.2 在矩形上合适的混合元 …… 277
4.3.3 在 RT_k 空间 Uzawa 型交替方向迭代方法 …… 278
4.3.4 Arrow-Hurwitz 交替方向格式 …… 281
4.3.5 数值实验的初步结果 …… 286
4.4 三维混合元交替方向迭代方法 …… 287
4.4.1 引言 …… 287
4.4.2 一个 Uzawa 交替方向方法 …… 289
4.4.3 对于 $\mathrm{RT}(0, J_h)$ 空间的特殊分析 …… 290
4.4.4 Arrow-Hurwitz 交替方向迭代格式 …… 293
4.4.5 数值试验结果 …… 294
4.5 混合有限元交替方向迭代方法的进展 …… 295
4.5.1 引言 …… 295
4.5.2 混合元空间的描述 …… 296
4.5.3 Uzawa 交替方向方法 …… 298
4.5.4 Arrow-Hurwitz 交替方向迭代方法 …… 300
4.5.5 虚拟时间步长的选择 …… 304
4.5.6 数值试验问题 …… 306
4.5.7 三维模型问题的计算结果 …… 306
4.5.8 二维问题的数值试验结果 …… 307
4.6 混合元交替方向迭代格式的稳定性和收敛性 …… 308
4.6.1 引言 …… 308
4.6.2 第 1 种修正 Arrow-Hurwitz 交替方向迭代格式 …… 309
4.6.3 第 2 种修正 Arrow-Hurwitz 交替方向迭代格式 …… 312
4.6.4 第 1 种三维 Arrow-Hurwitz 交替方向迭代格式 …… 314
4.6.5 第 2 种变形三维 Arrow-Hurwitz 交替方向迭代格式 …… 316
4.7 二阶椭圆问题的 Arrow-Hurwitz 交替方向混合元方法的谱分析 …… 318
4.7.1 引言 …… 318
4.7.2 Arrow-Hurwitz 交替方向迭代法 …… 319
参考文献 …… 322
第 5 章 二相渗流驱动问题的分数步方法 …… 324
5.1 可压缩二相渗流问题的分数步特征差分方法 …… 324

5.1.1 分数步特征差分格式 …… 326
5.1.2 收敛性分析 …… 327
5.1.3 推广和应用 …… 334
5.2 二相渗流问题迎风分数步差分格式 …… 336
5.2.1 引言 …… 336
5.2.2 二阶修正迎风分数步差分格式 …… 337
5.2.3 格式 I 的收敛性分析 …… 341
5.2.4 格式 II 的收敛性分析 …… 356
5.3 多组分可压缩渗流问题的分数步特征差分方法 …… 357
5.3.1 分数步特征差分格式 …… 358
5.3.2 L^2 模误差估计 …… 359
5.4 三维二相渗流动边值问题的迎风分数步差分方法 …… 364
5.4.1 引言 …… 364
5.4.2 迎风分数步差分格式 …… 366
5.4.3 收敛性分析 …… 373
5.4.4 应用 …… 374
5.5 三维热传导型半导体的分数步特征差分法 …… 376
5.5.1 特征分数步差分格式 …… 378
5.5.2 收敛性分析 …… 381
5.6 半导体的修正分数步迎风差分方法 …… 388
5.6.1 分数步迎风差分方法 …… 389
5.6.2 收敛性分析 …… 393
参考文献 …… 394
第 6 章 多层渗流耦合问题的分数步方法 …… 398
6.1 多层渗流方程耦合系统的迎风分数步差分方法 …… 398
6.1.1 二阶迎风分数步差分格式 …… 400
6.1.2 二阶格式的收敛性分析 …… 404
6.1.3 一阶迎风分数步差分格式及其收敛性分析 …… 416
6.1.4 应用 …… 418
6.2 非线性多层渗流方程耦合系统的迎风分数步差分方法 …… 419
6.2.1 引言 …… 419
6.2.2 迎风分数步差分方法 …… 421
6.2.3 收敛性分析 …… 424
6.3 多层非线性渗流耦合系统的特征分数步差分方法 …… 434
6.3.1 引言 …… 434

6.3.2　问题 I 的特征分数步差分格式 ······ 436
6.3.3　收敛性分析 ······ 439
6.3.4　问题 II 的特征分数步差分格式及分析 ······ 440
6.4　三维渗流耦合系统动边值问题迎风分数步差分方法 ······ 441
6.4.1　引言 ······ 441
6.4.2　区域变换 ······ 443
6.4.3　迎风差分格式和分析 ······ 447
6.4.4　迎风分数步差分格式和分析 ······ 454
6.4.5　拓广和实际应用 ······ 464
参考文献 ······ 466
第 7 章　渗流力学数值模拟中的交替方向有限元方法 ······ 469
7.1　油气资源数值模拟的交替方向特征变网格有限元格式 ······ 469
7.1.1　引言 ······ 469
7.1.2　交替方向特征修正变网格有限元格式 ······ 471
7.1.3　收敛性分析 ······ 474
7.2　多组分可压缩渗流问题特征交替方向有限元方法 ······ 483
7.2.1　某些准备工作 ······ 484
7.2.2　修正特征交替方向有限元程序 ······ 485
7.2.3　收敛性分析 ······ 489
7.3　强化采油特征交替方向有限元方法 ······ 498
7.3.1　数学模型 ······ 498
7.3.2　特征交替方向有限元格式 ······ 499
7.3.3　收敛性分析 ······ 502
7.4　非矩形域渗流耦合系统特征修正交替方向有限元方法 ······ 505
7.4.1　引言 ······ 505
7.4.2　某些准备工作 ······ 506
7.4.3　特征修正算子分裂有限元格式 ······ 507
7.4.4　收敛性分析 ······ 513
7.4.5　拓广和应用 ······ 523
7.5　半导体瞬态问题的变网格交替方向特征有限元方法 ······ 524
7.5.1　某些预备工作 ······ 525
7.5.2　特征修正交替方向变网格有限元格式 ······ 526
7.5.3　收敛性分析 ······ 531
参考文献 ······ 531
索引 ······ 535

第 1 章　对流–扩散问题分数步数值方法基础

在能源、环境、半导体器件数值模拟等科学和技术领域, 其数学模型是一类高维对流–扩散偏微分方程组的初边值问题, 对这类大规模科学与工程计算来说, 其计算节点通常可达数万甚至数千万个, 数值模拟时间有的需要长达数年、数十年, 甚至数千万年, 需用分数步方法来解决这类实际计算问题, 这类方法的基础是 Peaceman, Rachford 和 Douglas(1955 年) 的工作, 随后一些美国和前苏联的数学家的工作拓广和改进了这个方法, 他们是 Douglas, Rachford, Baker, Oliphant, Bagrinorvskii, Samarckii, Yanenko 等, 本章介绍这一领域的最基础部分.

本章共 4 节. 1.1 节为对流–扩散问题的特征差分方法和有限元方法. 1.2 节为求解抛物型方程的分数步简单格式及 Fourier 分析. 1.3 节为解多维抛物型方程的经济格式及能量模分析. 1.4 节为经济格式与因子化格式的等价性.

1.1　对流–扩散问题的特征差分方法和有限元方法

对流占优的扩散方程, 因其对流项系数远大于扩散项系数, 所以对流项为该方程中的主导项, 如果忽略扩散项, 则问题 “退化” 为一阶双曲型方程. 考虑到对流占优扩散问题的双曲特性, Douglas 与 Russell 于 1982 年首次将特征线方法应用于对流占优扩散方程 [1], 他们将特征线法与 Galerkin 有限元及有限差分相结合, 提出了求解对流占优扩散问题的特征有限元方法及特征差分方法, 阐明了它们的理论机理, 随后他们与其他学者又将特征有限元方法和特征差分方法应用于渗流力学中的多相渗流、半导体器件设计等科学计算问题, 取得一系列研究重要成果 [2~4].

1.1.1　模型问题及其特征有限元方法

考虑一维对流占优扩散方程的初值问题:

$$
\begin{cases}
c(x)\dfrac{\partial u}{\partial t} + b(x)\dfrac{\partial u}{\partial x} - \dfrac{\partial u}{\partial x}\left(a(x)\dfrac{\partial u}{\partial x}\right) = f(x,t), & (x,t) \in \mathbf{R} \times (0,T], \qquad (1.1.1\text{a}) \\
u(x,0) = u_0(x), & x \in \mathbf{R}, \qquad (1.1.1\text{b})
\end{cases}
$$

此处 $a,\ b,\ c \in H^1(\mathbf{R}) \cup W^{1,\infty}(\mathbf{R})$, $f \in L^2\left((0,T], L^2(\mathbf{R})\right)$, $u_0 \in H^1(\mathbf{R})$, 而 $H^1(\mathbf{R})$, $W^{1,\infty}(\mathbf{R})$ 是区域 $\mathbf{R} = (-\infty, +\infty)$ 上的 Sobolev 空间. 还假定

$$
c(x) \geqslant c_0 > 0, a(x) \geqslant a_0 > 0, |b(x)| \gg a(x), \quad \forall x \in \mathbf{R}, \tag{1.1.2a}
$$

$$\left|\frac{b(x)}{c(x)}\right| + \left|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{b(x)}{c(x)}\right)\right| \leqslant M, \quad \forall x \in \mathbf{R}. \tag{1.1.2b}$$

数值求解问题 (1.1.1) 的特征有限元方法的基本思想是, 将 (1.1.1a) 中的一阶双曲项 $c(x)\dfrac{\partial u}{\partial t} + b(x)\dfrac{\partial u}{\partial x}$ 改写为沿特征方向 τ 的方向导数, 从而将 (1.1.1a)改写为关于变元 τ, x 的不含一阶空间导数项的热传导方程, 然后再对该热传导方程作 Galerkin 有限元全离散, 即得特征有限元格式.

记 $\psi(x) = \left[c(x)^2 + b(x)^2\right]^{1/2}, \tau(x) = \left(b(x)\psi^{-1}(x), c(x)\psi^{-1}(x)\right)^{\mathrm{T}}$, 则有

$$\psi(x)\frac{\partial u}{\partial \tau(x)} = c(x)\frac{\partial}{\partial t} + b(x)\frac{\partial}{\partial x}, \tag{1.1.3}$$

从而方程 (1.1.1a) 可改写为

$$\psi(x)\frac{\partial u}{\partial \tau(x)} - \frac{\partial}{\partial x}\left(a(x)\frac{\partial u}{\partial t}\right) = f(x,t), \quad x \in \mathbf{R}, t \in (0,T]. \tag{1.1.4}$$

注意到, 当 $u \in H^1(\mathbf{R})$ 时, 有 $\lim\limits_{|x|\to\infty} u(x) = 0$, 从而问题的弱形式是: 求可微映射 $u(t): (0,T] \to H^1(\mathbf{R})$, 使

$$\left(\psi\frac{\partial u}{\partial \tau}, v\right) + A(u,v) = (f,v), \quad \forall v \in H^1(\mathbf{R}), 0 < t \leqslant T, \tag{1.1.5}$$

此处 $(w_1, w_2) = \displaystyle\int_{\mathbf{R}} w_1 \cdot w_2 \mathrm{d}x, A(w_1, w_2) = \int_{\mathbf{R}} a w_1' \cdot w_2' \mathrm{d}x$.

对问题 (1.1.5) 作 Galerkin 有限元全离散, 设 Δt 为取定的时间步长, 记 $t^n = n\Delta t, n = 0, 1, \cdots, N = [T/\Delta t]$. 在 $t = t^n$ 上, 任取点 $A = (x, t^n)$, 先建立 $\left(\psi\dfrac{\partial u}{\partial \tau}\right)_A = \left(\psi\dfrac{\partial u}{\partial \tau}\right)^n(x)$的差商离散. 为此, 过点 A 沿 $\tau(A) = \tau(x, t^n) = \tau(x)$ 作直线 l_A(即过点 A 之特征线的线性近似) 与 $t = t^{n-1}$ 相较于点 $B = (\bar{x}, t^{n-1})$ 由图 1.1.1 易见

$$\bar{x} = x - \frac{b(x)}{c(x)}\Delta t. \tag{1.1.6}$$

在 A 点 Euler 向后差商近似

$$\begin{aligned}\left(\psi\frac{\partial u}{\partial \tau}\right)(A) &\approx \psi(x)\frac{u(A) - u(B)}{|AB|} = \psi(x)\frac{u(x,t^n) - u(\bar{x}, t^{n-1})}{\left[(x-\bar{x})^2 + (\Delta t)^2\right]^{1/2}} \\ &= c(x)\frac{u(x,t^n) - u(\bar{x}, t^{n-1})}{\Delta t}.\end{aligned} \tag{1.1.7}$$

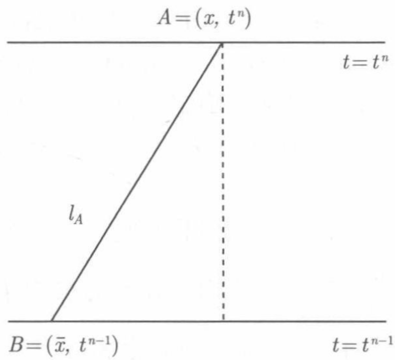

图 1.1.1 特征线示意图

因此在此时层 $t=t^n$ 上, (1.1.5) 可改写为

$$\begin{aligned}&\left(c(x)\frac{u(x,t^n)-u(\bar{x},t^{n-1})}{\Delta t},v\right)+A(u(t),v)\\=&(f^n,v)+\left(c(x)\frac{u(x,t^n)-u(\bar{x},t^{n-1})}{\Delta t}\right.\\&\left.-\psi\left(\frac{\partial u}{\partial\tau}\right)(x,t^n),v\right),\quad\forall v\in H^1(\mathbf{R}),\end{aligned}\tag{1.1.8}$$

此处 $f^n=f(x,t^n)$.

设 $V_h\subset H^1(\mathbf{R})\cap W^{1,\infty}(\mathbf{R})$ 为选定的有限元空间, $V_h\subset S_{1,q}(\mathbf{R})(q\geqslant 2)$, 即 V_h 为分段 $q-1$ 次多项式空间且具有如下的逼近性质, $\forall\varphi\in H^q(\mathbf{R}),1\leqslant s\leqslant q$, 有

$$\inf_{v\in V_h}\{\|\varphi-v\|+h\|\varphi-v\|_1\}\leqslant M_0\|\varphi\|_s h^s,\tag{1.1.9}$$

此处 $\|\cdot\|_s=\|\cdot\|_{H^s(\mathbf{R})}$, M_0 为与 φ 无关之常数. $t=t^n$ 上, 记有限元解为 u_h^n, 在 (1.1.8) 中略去右端第二项, 即沿 τ 方向的局部逼近误差项. 将检验函数空间 $H^1(\mathbf{R})$ 换为 V_h, 问题 (1.1.1) 的 Euler 向后特征有限格式定义为: 求映射 $\{u_h^n\}:[t^0,t^1,\cdots,t^n]\to V_h$, 使得

$$\left(c(x)\frac{u_h^n-\bar{u}_h^{n-1}}{\Delta t},v\right)+A(u_h^n,v)=(f^n,v),\quad\forall v\in V_h,n=1,2,\cdots,N,\tag{1.1.10a}$$

$$A\left(u_h^0-u_0,v\right)+\left(u_h^0-u_0,v\right)=0,\quad\forall v\in V_h,\tag{1.1.10b}$$

此处 $\bar{u}_h^{n-1}=u_h^{n-1}(\bar{x})$. 在 (1.1.10b) 中将有限元的初值 u_h^0 定义为原初始值的椭圆投影, 仅仅是为了误差分析理论处理上的简便, 也可用其他方式定义 u_h^0, 如取 u_h^0 为 u_0 在 V_h 中的 L^2 投影或插值等.

因双线性泛函 $B(w,v)=A(w,v)+(w,v)$ 在 $H^1(\mathbf{R})\times H^1(\mathbf{R})$ 上对称、正定、有界, 线性泛函 $l(v)=A(u_0,v)+(u_0,v)$ 在 $H^1(\mathbf{R})$ 上有界, $V_h\subset H^1(\mathbf{R})$, 由 Lax-Milgram 定理知, 从 (1.1.10b) 可以唯一确定初值 u_h^0, 同理注意到 $c(x)\geqslant c_0>0$, 可以推出, 从 (1.1.10) 利用 u_h^0 可依次唯一确定 $u_h^1,u_h^2,\cdots,u_h^N$, 即格式 (1.1.10) 唯一可解.

从特征有限元格式 (1.1.10) 的构造过程可见, 其一个显著特点是, 用沿一阶双曲项特征方向 τ 的导数 $\psi\dfrac{\partial u}{\partial\tau}$ 取代传统 Galerkin 方法中按 (1.1.1) 沿时间方向 t 的导数 $c\dfrac{\partial u}{\partial t}$, 用沿 τ 方向演化的步进数值格式取代沿 t 方向演化的步进格式, 特征有限元格式在算法构造上就反映了原问题 (1.1.1)的解 u“沿特征线传播” 的对流占优性质, 且问题 (1.1.1) 的解 u 沿 τ 方向的导数$\dfrac{\partial^2u}{\partial\tau^2}$远小于沿 t 方向的导数 $\dfrac{\partial^2u}{\partial t^2}$, 从 $\psi\dfrac{\partial u}{\partial\tau}$作差商离散所产生的局部逼近误差远小于从 $c\dfrac{\partial u}{\partial t}$作同一离散所产生的逼近误差, 因而, 特征有限元格式比 Galerkin 格式有更好的精度和数值效果. 由于特征有限元格式具有解沿特征线方向演化的 “迎风” 性质, 所以它比 Galerkin 格式有着更好的稳定性. 且可采用比 Galerkin 格式更大的时间步长 Δt.

以后记号 M 和 ε 分别表示一般的正常数和小正数. 在不同之处有不同的含义.

1.1.2　特征有限元格式的误差估计

为对特征有限元格式建立 L^2 误差估计. 对问题 (1.1.1) 的解 $u(t)$ 引进椭圆投影 $w_h(t):(0,T]\to V_h$, 使得

$$A(u(t)-w_h(t),v)+(u(t)-w_h(t),v)=0,\quad \forall v\in V_h, 0\leqslant t\leqslant T,\tag{1.1.11}$$

显然 $w_h(t)$ 存在唯一. 记 $\eta=u-w_h,\xi=u_h-w_h(t),\zeta=u-u_h=\eta-\xi$.

从 (1.1.8)、(1.1.10) 和 (1.1.11) 可得误差方程:

$$\begin{aligned}&\left(c(x)\frac{\xi^n-\bar{\xi}^{n-1}}{\Delta t},v\right)+A\left(\xi^n,v\right)\\&=\left(\psi\left(\frac{\partial u}{\partial\tau}\right)^n-c(x)\frac{u^n-\bar{u}^{n-1}}{\Delta t},v\right)\\&\quad+\left(c(x)\frac{\eta^n-\bar{\eta}^{n-1}}{\Delta t},v\right)-(\eta^n,v),\quad\forall v\in V_h,n=1,2,\cdots,N.\end{aligned}\tag{1.1.12}$$

由 (1.1.10b)，(1.1.11) 知 $u_h^0=w_h(0)=w_h^0$ 从而 $\xi^0=0$.

选定检验函数 $v=\xi^n$, 对于 (1.1.12) 右端第一项, 估计 $\left\|\psi\dfrac{\partial u^n}{\partial\tau}-c\dfrac{u^n-\bar{u}^{n-1}}{\Delta t}\right\|$.