发展方程数值分析

矢嶋信男　野木達夫　著
王宝兴　殷广济　雷光耀　译
孙 和 生　校

人民教育出版社

本书是根据日本岩波書店1977年出版的矢嶋信男、野木達夫合著的《発展方程式の数值解析》一书译出. 可供从事计算数学、计算力学、计算物理方面的科技、教学人员和高年级大学生参考.

发展方程数值分析

矢嶋信男　野木達夫　著
王宝兴　殷广济　雷光耀　译
孙和生　校

*

人民教育出版社出版
新华书店北京发行所发行
河北省香河县印刷厂印装

*

开本 850×1168 1/32　印张 8.5　字数 200,000
1982年3月第1版　1983年6月第1次印刷
印数 00,001—87,00
书号 13012·0736　定价 1.15 元

前　言

本书提供了发展方程差分近似数值解方法的理论基础，并叙述了寻求数值解过程中产生的不够令人满意的现象及其处理方法．我们力求写得使读者能够了解数值分析的全貌．

用差分方程代替微分方程，进而求出数值解的这种思想，如果从微分概念原来的定义看，则是非常自然的事情．但是，对处理发展系统的情形来说，微分方程系统和差分方程系统之间却存在着本质的区别．原系统的发展过程，是以某些物理量在空间传播的“速度”为其基本特征的，扩散系数和波的传播“速度”等就是如此．因此，支配发展系统的微分方程就含有“速度”这样的参数．另一方面，当微分方程差分化时，由于不仅空间变量而且时间变量也都作为离散量处理，因此“差分系统中的特征速度”也就作为新参数出现．例如，(空间差分间隔)/(时间差分间隔)和(空间差分间隔)^2/(时间差分间隔)等就是这样的量．如果这种“差分形式的特征速度”比刻划发展过程特征的“速度”小，那么差分系统就不能作为稳定的系统跟踪发展过程，因此，差分解就不能正确地描述发展系统的行为．这一事实，早在1928年就由 Courant-Friedrichs-Lewy 等人在差分方程解的收敛性问题的课题下考察过．后来，在四十年代中期，von Neumann 把它作为差分系统中的本质问题提出，开始在数值计算中引入稳定性的概念．实际上，这种稳定性与解的收敛性问题密切相关．并且，由 Lax 以等价性定理的形式作了明确的阐述．从此以后，差分格式的稳定性条件就被看作是数值分析里最重要的问题之一，而初值问题数值解的理论就在六十年代迅速地完备起来．本书从第一章到第四章讨论的就是这些问题，而且在

第八章还讨论了有关差分系统的边界条件所出现的稳定性问题.

对于不容易做解析处理的非线性问题，数值解方法却发挥了威力. 特别是，找出能处理接近于间断解的冲击波解这种差分方法是非常重要的. 由于 von Neumann-Richtmyer 在冲击波波面附近引进了起有效作用的粘性项，从而为这种问题提供了解决办法. 实际上，如果注意到这种差分化过程本身就带有耗散效应，便知道并不一定非得人为地加进粘性项. 关于这一点，我们将在第五章，以气体冲击波为例加以具体说明.

当进行数值计算时，由于差分间隔总是有限的，随着系统变化的空间尺度接近于差分间隔，以"差分系统中的特征速度"进行的现象就会以直观的效应体现出来. 这种现象就称为差分系统的色散或耗散现象. 这种效应在非线性波动的波面附近表现得特别明显，它把单调的波形变为具有振动结构的波形，或者被抹平成为非常平稳的波形. 于是，试图避免这种效应就成为六十年代后半期以来的研究课题之一. 在第六章和第七章将从简单的例子出发来论述这个问题.

无论计算机怎样向大型化、高速化发展，在处理高维问题时，引入有效的数值解方法总是不可缺少的. Peaceman-Rachford 在 1955 年研究了具有划时代意义的经济与易解二者兼备的差分方法. 从此，它就在分数步长法这一更加广泛的领域里不断得到改进. 这些具体做法将在第九章、第十章叙述.

实际应用强烈要求更有效、更精确地求解微分方程，这促进了差分方法的发展，使其逐步完备起来，并在此过程中谋求数学上的系统化. 系统化的中心就是建立差分系统的稳定性概念. 在展开理论探讨时，我们将仿效微分方程初值问题的类推方法. 但是，对于给定的问题，应该选择什么样的差分方法，其选择标准还未能建立起来. 为了掌握这个问题的更本质所在，人们进行了尝试，譬

如，利用发展系统的对称性来选择差分方法还只是开始，乃是今后的一个研究课题．这个问题，在本书的第五章将会接触到，希望能引起读者的兴趣．

当然，数值分析是以实际求解为前提的．在这个意义上强烈地要求在实际应用中的有效性．为了回答这个问题，本书的结构与历来的写法比较，我们略微做了些不同的尝试．首先，对所引用的定理我们未做详尽的叙述，但是，我们力求在其意义和用法方面加以说明．其次，如何理解并克服实际进行数值分析时所产生的形形色色的困难，显然是我们考虑的重点．我们从内容上还尽量收集了各种差分格式的优缺点．关于变系数发展系统的一般理论，它在内容上和实际应用中都是很重要的，但是由于篇幅有限，我们担心写起来难以收笔而不得不全部割爱．有关这部分内容请读者参阅书末开列的文献．还有，近来对非线性色散波动，特别是与孤立子(soliton)有关的物理现象引起了人们的重视，因此对于带有色散效应的非线性方程寻求数值解问题也就盛行起来．这些问题虽然在本书没有介绍，但也没有什么特别新颖的数值解法．所采用的都是稳定的、精确度比较高的差分格式．

本书前四章是由矢嶋执笔，以后各章由野木执笔．工作是各自分别进行的，但随时都注意到整体的统一．我们原意是想使不熟悉数学的人也能容易理解，不过也许会使读者反而感到繁锁．作者感到不安的，与其说是由于考虑不周而未能圆满地达到目的，倒不如说更担心我们所作的解释是否能经受住时间的考验．

促进本书出版的谷内俊弥教授仔细地阅读了原稿，并提出了宝贵的意见，特在此致谢．

1977 年 2 月

矢嶋信男
野木達夫

目　录

第1章　发展系统的数值解法

§1.1　发展方程与数值解

在自然现象中，我们所遇到的许多问题，都要求我们弄清：当在 t_0 时刻给定一个系统为某一状态时，在这以后的时刻 $t(t>t_0)$ 系统将处于怎样的状态？当然，这时需要知道支配该系统随时间发展的运动规律．不过即便能给出这种规律，问题也还没有完全解决．实际上还有根据这样的规律追踪系统随时间变化的问题．就是说，必须解出用数学公式表达这一规律的、并以 t_0 时刻系统状态量的值为初始值的数学问题．这样的问题叫做初值问题．所谓可以追踪状态量随时间变化的问题，换言之，初值问题在数学上有意义这件事，可以用下面的方式表达：有某个方程，它的解对给定的初值是唯一确定的，并且对初始值的任何微小的变化，方程的解也只有微小的变化，这时就称该初值问题是适定的(wellposed)．初值问题是适定的这种方程就叫做发展方程 (evolution equation)．满足该定义的发展方程就正是本书所要研究的对象．

根据解析的方法求发展方程的解，并通过已知函数表示出来，这只有在极个别的情形才能做到．而在多数情形，有关系统随时间变化的定量方面的问题，则要用数值解法来追踪．特别当发展方程为非线性时，就不能不依赖于数值解方法．在实际求解给定的种种问题方面，数值解方法具有非常实用的价值．由于采用了数值解，问题不但在定量方面得以处理，而且最终从本质上弄清楚了系统的整个发展过程．从数值解法入手，建立起有效的解析方

法，就促进了下面的发展．就这样，伴随大型电子计算机的发展，von Neumann 倡导了一种近似方法，这是结合使用数值解法和解析方法来分解并本质地逼近复杂现象的一种方法．后来由 Ulam①把这种方法定名为 Synergesis（或称协作近似，synergesis approach）．现在这种方法在各个领域都有广泛的应用．

我们这里所提到的发展方程都只限于偏微分方程．诸如扩散方程、波动方程都属于这一类．为了使用计算机数值地解出这些偏微分方程，我们可以采用差分化的方法．由于所考虑的系统的状态量，不仅依赖于时间变量 t，而且还依赖空间坐标 x，因此差分化时，首先要把连续的(t, x)空间转换成离散的网格空间．然后在每个网格点上考察系统的各种状态量．因而，偏微分方程是用定义于网格空间的各种状态量之间的关系，即用差分方程来近似的．这个差分方程的解如何逼近原来的偏微分方程的解，这是数值分析中的关键问题．假设网格间隔取得很小，是不是就可以说，差分方程的解无论如何都近似于原偏微分方程的解呢？未必如此．最早开始研究这个问题的是 Courant-Friedrichs-Lewy．根据他们的研究，要使差分方程的解能逼近偏微分方程的解，即为了保证其收敛性，时间变量的步长和空间坐标的网格间隔之间，必须具备某种条件才行．

解差分方程时，计算机只能使用有限位的数字进行计算，因此就会产生舍入误差．在某时刻产生的舍入误差，如果随时间不断增长，数值解就会失去意义．求解差分方程的初值问题时，由于时间变量是不断推进的，所以在计算过程中，舍入误差的影响必须保

---

① S. M. Ulam, *A Collection of Mathematical Problems*, Interscience (1960); N. J. Zabusky, *Synergetic approach to nonlinear wave propagation* (*Nonlinear Partial Differential Equations*, ed. by W. F. Ames, Academi Press(1967)).

持不增长才行．这个问题就叫做差分方程的稳定性问题，是首先由 von Neumann 提出的．稳定与否，当然依赖于时间步长和空间网格间隔之间的选取．

对给出的差分方程，其收敛性和稳定性能否保证以及如何保证，一般依赖于差分方程的形式以及初始条件和边界条件．当差分方程为线性时，稳定性(通常也包括收敛性)不取决于初始值和边界值．在求解偏微分方程数值解时，必须使用稳定性和收敛性两者都能得到保证的差分方程．在满足稳定性和收敛性的前提条件下，如果时间步长和空间网格间隔取得越小，那么所求得的数值解就越接近原来的偏微分方程的解．

§1.2　发展方程举例1——扩散方程

为了有效地进行数值计算，必须了解所考察的微分方程的性质．因此，在采取具体步骤进行数值分析之前，在本节和下一节，我们将给出发展方程的例子，并对初值问题的解作些具体说明．

本节，我们以介质微粒的扩散现象为例，譬如说，观察一个介质微粒，它与其它微粒反复碰撞若干次，同时在运动中描绘出曲折复杂的轨道．当我们用比平均自由程大的空间尺度来平均这个运动过程时，就得到描述微粒密度 u 变化的方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}=D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \qquad (1.2.1)$$

这里假设扩散是在同种介质内进行的，扩散系数 D 为常数．而且为了避免使问题复杂化，我们仅考虑一维的扩散过程，密度 u 只依赖于 x 和 t．此外，方程(1.2.1)还可以描述同种介质的热传导问题．

现在考虑方程(1.2.1)在有限区间 $0\leqslant x\leqslant L$ 上的初值问题．在 $t=0$ 给出初始条件

$$u(x,0)=f(x) \qquad (0\leqslant x\leqslant L). \tag{1.2.2}$$

在所考虑的区间的两端，通常假设 u 保持为 0，即假设边界条件为

$$u(0,t)=u(L,t)=0 \qquad (t\geqslant 0) \tag{1.2.3}$$

在以下的讨论中，我们假定 $f(x)$在区间 $0\leqslant x\leqslant L$ 上连续.

用熟知的分离变量法，试设

$$u(x,t)=X(x)T(t) \tag{1.2.4}$$

并满足

$$X(0)=X(L)=0 \tag{1.2.5}$$

把(1. 2. 4)代入(1. 2. 1)，即得

$$\frac{T'(t)}{T(t)}=D\frac{X''(x)}{X(x)}=-\lambda \qquad (\text{常数})$$

因此有

$$T(t)=e^{-\lambda t} \tag{1.2.6}$$

$$DX''=-\lambda X \tag{1.2.7}$$

利用(1. 2. 7)和(1. 2. 5)，由

$$\lambda\int_0^L X^2(x)dx=D\int_0^L (X'(x))^2dx>0$$

容易看出 $\lambda>0$. 因此，对于 $\lambda>0$，(1. 2. 7)的解为

$$X(x)=A\sin(\sqrt{\lambda/D}\,x)+B\cos(\sqrt{\lambda/D}\,x)$$

再利用条件(1. 2. 5)，即得

$$B=0, \quad \lambda=\lambda_m=\frac{\pi^2 D}{L^2}m^2 \qquad (m=\pm 1, \pm 2, \cdots) \tag{1.2.8}$$

因此，我们把对应于全部本征值 λ_m 的(1. 2. 4)形的解叠加起来，则满足边界条件(1. 2. 3)的 $u(x,t)$就可以写成

$$u(x,t)=\sum_{m=1}^{\infty} f_m \exp\left(-\frac{\pi^2 D}{L^2}m^2 t\right)\sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \tag{1.2.9}$$

其中关于 m 只限于正数求和. 不过从 $-\infty$ 到∞求和也可以，但这时的 Fourier 系数是 f'_m，它用 (1. 2. 9) 中的 f_m，通过关系式

$f_m=f'_m-f'_{-m}(m>0)$来表示.

其次,$u(x,t)$必须满足初始条件(1.2.2),即

$$f(x)=\sum_{m=1}^{\infty}f_m\sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \tag{1.2.10}$$

这个条件定出 Fourier 系数 f_m:

$$f_m=\frac{2}{L}\int_0^L f(x)\sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right)dx \tag{1.2.11}$$

当把它代入(1.2.9),即可看出,对任意时刻 t 的解 $u(x,t)$,都可以用初值 $f(x)$直接表示为

$$u(x,t)=\int_0^L G_L(x,x';t)f(x')dx' \tag{1.2.12}$$

$$\begin{aligned}&G_L(x,x';t)\\&=\frac{2}{L}\sum_{m=1}^{\infty}\exp\left(-\frac{\pi^2D}{L^2}m^2t\right)\sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{m\pi x'}{L}\right)\end{aligned} \tag{1.2.13}$$

其中$G_L(x,x';t)$是在有限区间 $0\leqslant x\leqslant L$ 的两端满足 0 边界条件的扩散方程的 Green 函数.

把(1.2.13)稍加改写,便有

$$\begin{aligned}&G_L(x,x';t)=\bar{G}_L(x-x',t)-\bar{G}_L(x+x',t)\\&\bar{G}_L(y,\ t)=\frac{1}{2L}\sum_{m=-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{\pi^2D}{L^2}m^2t\right)\exp\left(i\frac{m\pi}{L}y\right)\\&\qquad=\frac{1}{2L}\vartheta_3\left(\frac{y}{2L},\ i\frac{\pi D}{L^2}t\right)\end{aligned} \tag{1.2.14}$$

其中 ϑ_3 是椭圆 ϑ 函数,定义为

$$\vartheta_3(v,\tau)=\sum_{m=-\infty}^{\infty}e^{2\pi imv}e^{i\pi m2\tau}$$

如果利用已知的 Jacobi 虚数变换公式

$$\vartheta_3(v,\tau)=\sqrt{\frac{i}{\tau}}e^{-i\pi v2/\tau}\vartheta_3\left(-\frac{v}{\tau},-\frac{1}{\tau}\right)$$

则 $\bar{G}_L(y, t)$也可表为

$$\bar{G}_L(y, t)=\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\sum_{m=-\infty}^{\infty}e^{-(y+2mL)^2/4Dt} \tag{1.2.15}$$

利用 $\bar{G}_L$，则(1.2.12)就可以写成

$$\begin{aligned}u(x, t)&=\int_0^L(\bar{G}_L(x-x', t)-\bar{G}_L(x+x', t))f(x')dx'\\&=\int_{-L}^{L}\bar{G}_L(x-x', t)\bar{f}(x')dx' \qquad (1.2.16)\end{aligned}$$

在上式后一个表达式里，积分域扩大为从 $-L$ 到 L，而 $\bar{f}(x)$取作

$$\bar{f}(x)=\begin{cases}f(x) & (0\leqslant x\leqslant L)\\ -f(-x) & (-L\leqslant x\leqslant 0)\end{cases}$$

由(1.2.15)式很容易得出 $\bar{G}_L(y, t)$的周期性与对称性.

$$\bar{G}_L(y+2L, t)=\bar{G}_L(y, t) \tag{1.2.17}$$

$$\bar{G}_L(-y, t)=\bar{G}_L(y, t) \tag{1.2.18}$$

如果利用 $\bar{f}(x)$关于 x 是奇函数的事实，可把解写成

$$\begin{aligned}u(-x, t)&=\int_{-L}^{L}\bar{G}_L(-x-x', t)\bar{f}(x')dx'\\&=\int_{-L}^{L}\bar{G}_L(x+x', t)\bar{f}(x')dx'\\&=\int_{-L}^{L}\bar{G}_L(x-x', t)\bar{f}(-x')dx'=-u(x, t)\end{aligned}$$

根据原扩散方程对 x 反演不变的事实，这直接表明解保持空间对称性. 利用(1.2.17)和(1.2.18)同理可得

$$u(L, t)=-u(L, t), \qquad u(0, t)=-u(0, t)$$

这就给出 $u(0, t)=u(L, t)=0$，说明所求的解(1.2.16)确实满足边界条件(1.2.3). 同时再注意到(1.2.16)在 $t\to 0$ 时逼近于 $f(x)$，从这个意义上说，解也确实满足初始条件(1.2.2).

因为从(1.2.15)知道 $\bar{G}_L(y, t)$是正的，所以有下面的不等式成立

$$|u(x,t)|=\left|\int_{-L}^{L}\bar{G}_L(x-x',t)\bar{f}(x')dx'\right|$$
$$\leqslant\int_{-L}^{L}\bar{G}_L(x-x',t)dx'\ \underset{0\leqslant x\leqslant L}{\mathrm{Max}}|f(x)|$$

这里，如果注意到

$$\int_{-L}^{L}\bar{G}_L(x-x',t)dx'$$
$$=\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\sum_{m=-\infty}^{\infty}\int_{(2m-1)L}^{(2m+1)L}e^{-(z-x)^2/4Dt}dz$$
$$=\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-(z-x)^2/4Dt}dz=1$$

便得到

$$|u(x,t)|\leqslant\underset{0\leqslant x\leqslant L}{\mathrm{Max}}|f(x)| \tag{1.2.19}$$

实际上，下面将看到比(1.2.19)更为一般的估计也成立. 设 $u(x,t)$为区域 $0\leqslant x\leqslant L$, $t\geqslant 0$ 上扩散方程(1.2.1) 的解，则 $u(x,t)$ 的最大值只能在 $t=0$, 或者 $x=0$, 或者 $x=L$ 处达到. 这叫做最大值原理，是很容易证明的. 假设 $u(x,t)$是(1.2.1)的解，我们来考虑 $\nu(x,t)=u(x,t)+\varepsilon x^2$ $(\varepsilon>0)$. 由(1.2.1)，它显然满足

$$\frac{\partial\nu}{\partial t}<\frac{\partial^2\nu}{\partial x^2}$$

假设这个 $\nu(x,t)$在 $0<x<L, 0<t\leqslant T$ 中取最大值，例如在(x_0, t_0)点上取到最大值. 由于 ν 是光滑的，所以在这里 ν 也是局部地成为极大，即满足

$$\frac{\partial\nu}{\partial t}(x_0,t_0)\geqslant 0,\qquad \frac{\partial^2\nu}{\partial x^2}(x_0,t_0)\leqslant 0$$

其中第一个不等式本来是等号成立，但是若还包括 $t_0=T$ 的情形，就成为$\geqslant$了. 这与上面的关系式相矛盾，因此，$\nu(x,t)$的最大值必定在 $x=0$, 或者 $x=L$, 或者 $t=0$ 中的某一条直线上取到. 假设 $u(x,t)$在这条直线上的最大值为M，则在区域 $0\leqslant x\leqslant L$, $0\leqslant t\leqslant T$ 所有点上就有

$$\nu(x,t)\leqslant M+\varepsilon L^2$$

成立. 由于 ε 的任意性，结果便有 $u(x,t)\leqslant M$.

现在，若令初始值 $f(x)$只改变 $\delta f(x)$，则相应地 $u(x,t)$也会

改变 $\delta u(x, t)$. 由于原来的方程是线性的，所以

$$\delta u(x, t)=\int_{-L}^{L}\bar{G}_L(x-x', t)\delta f(x')dx'$$

同(1.2.19)的证明方法一样，可得

$$|\delta u(x, t)|\leqslant \operatorname*{Max}_{0\leqslant x\leqslant L}|\delta f(x)|$$

这表明：对于初始值 $f(x)$的微小变动(δf)，解的变化(δu)也是很微小的. 于是推出所考虑的初值问题是适定的.

以上，扩散方程都是在有限区间上考察的；下面，我们按$L\to\infty$的方式延拓到无限(半无限)区间.

在(1.2.16)中令 $L\to\infty$，就得到在初始条件和边界条件

$$u(x, 0)=f(x) \qquad (x\geqslant 0) \qquad (1.2.20)$$

$$u(0, t)=u(\infty, t)=0 \qquad (t\geqslant 0) \qquad (1.2.21)$$

下在半无限空间 $x\geqslant 0$ 的区域中解扩散方程的解. 在(1.2.15)中令L为无穷大，则有

$$G(y, t)=\lim_{L\to\infty}\bar{G}_L(y, t)=\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}e^{-y^2/4Dt} \qquad (1.2.22)$$

因此，$u(x, t)$可表为

$$u(x, t)=\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\left[\int_0^{\infty}e^{-(x-x')^2/4Dt}f(x')dx'\right.$$
$$\left.-\int_0^{\infty}e^{-(x+x')^2/4Dt}f(x')dx'\right] \qquad (1.2.23)$$

在(1.2.16)中将空间坐标的原点移动 $L/2$，设

$$x=\bar{x}+\frac{L}{2}$$

再把 $f(x')$写成 $f(\bar{x}')$，则有

$$u(\bar{x}, t)=\int_{-L/2}^{L/2}(\bar{G}_L(\bar{x}-\bar{x}', t)$$
$$-\bar{G}_L(\bar{x}+\bar{x}'+L, t))f(\bar{x}')d\bar{x}'$$

在这里令 $L\to\infty$，并利用

$$\lim_{L\to\infty}\tilde{G}_L(y+L,t)=\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\lim_{L\to\infty}\sum_{n=\pm\text{odd}}e^{-(y+nL)^2/4Dt}$$
$$=0$$

便得到在无限空间$-\infty<x<\infty$上初值问题的解

$$u(x,t)=\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-(x-x')^2/4Dt}f(x')dx' \tag{1.2.24}$$

在 $t=0$, (1.2.24)的确满足

$$u(x,0)=f(x)$$

我们注意到，(1.2.23)可以利用(1.2.24)中 $f(x)$的奇函数性质来得到．这时，$u(x,t)$也是奇函数，因此满足$u(0,t)=0$.

虽然现在推广到无限空间，但与(1.2.19)相对应的绝对值估计式仍然成立

$$|u(x,t)|\leqslant\operatorname*{Max}_{x}|f(x)| \tag{1.2.25}$$

所以，初值问题的适定性可以得到保证．

§1.3 发展方程举例2——波动方程

上节我们考察了扩散方程的初值问题，它属于抛物型微分方程的范畴．其特征之一是对时间反演求解时，不能保证适定性．对这一点，只要在扩散方程的初值解(1.2.9)上，作 $t\to-t$ 的置换就会立即明白．这个问题与扩散现象在本质上属于不可逆过程有关．

这一节考察波动方程．波动方程是发展方程之一，属于双曲型微分方程．为简单起见，我们这里只讨论用相位速度 c 传播的一维波动现象．假设 u 为波的振幅，则 u 满足方程

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}-c^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=0 \tag{1.3.1}$$

其中 c 为常数．我们知道，(1.3.1)也可以作为描述弦振动的微分