应用数学和力学讲座丛书

计算物理学

秦元勋 编著

SL

四川科学技术出版社

《应用数学和力学》讲座丛书

计 算 物 理 学

主编著 秦元勋
编　著 王贻仁　刘尊全　雷光耀　吴声昌
张锁春　常谦顺　管克英　李鲁平

四川科学技术出版社

一九八四年·成都

责任编辑：崔泽海

封面设计：李文金

本丛书原由四川人民出版社出版。一九八二年底经上级批准成立四川科学技术出版社。自一九八四年起本丛书由四川科学技术出版社继续出版。

计算物理学 秦元勋等

四川科学技术出版社出版 重庆印制一厂印刷

新华书店重庆发行所发行

开本 787×1092毫米 1/16 印张10.5 字数243千

1984年7月第一版 1984年7月第一次印刷

印数：1—6,450册

书号：13298·8 定价：1.65 元

[内 容 简 介]

计算物理学是利用现代大型快速计算机对物理过程进行数值模拟的一门新学科。它起源于第二次世界大战中美国研制核武器的工作。它与大型快速计算机的发展是互相促进的。现在计算物理学已广泛应用于原子能、航空与航天、气象、海洋、化工、石油、建筑等工业部门。在基础科学研究中，对于天文学、力学、物理学、化学以至生理学、医学等都已成为不可缺少的现代化研究手段。

本书分为三个部分。第一部分对这门学科的简史、性质、范围等作一概括性的论述。第二部分对于各种典型运动过程作一简要介绍，给出计算方法和具体算例，其中包括星云运动、孤立子运动、非线性弹性振动、中子输运过程、冲击波传播、潮汐运动、辐射热传导等各方面的问题。第三部分介绍关于人员组织、工作实践中错误的避免与纠正和有关学科的配合发展等方面的内容。

本书是我国在这方面首次出版的专著。编著者对书中的大部分内容做过实际工作。本书可作为计算物理专业高年级大学生、研究生和教师的参考书，也适用于从事数值计算的工程技术人员。

《应用数学和力学》讲座丛书序

《应用数学和力学》编委会为了适应四化建设的需要，推动应用数学和力学方面的学术交流，自去年五月起在全国各地举办不定期的《应用数学和力学》讲座，由本刊编委同志义务分任主讲，讲授有关专题，介绍最新成就，深得各方同志支持和欢迎。去年已举办讲座五期，今后将继续举办。由于场地、名额所限，希望能参加听讲而向隅的同志很多，纷纷提出要求。为此，在四川人民出版社马骏副总编的建议下，特将讲座材料内容，编成丛书，陆续分册出版，以供读者。

长期以来，应用数学和力学是相辅相成的。晚近的发展更加如此。例如：由于人类生产活动的飞速发展，生产材料的日益更新，我们要处理比弹性、塑性性、不可压缩流体、非粘性流体等更为复杂的介质，从而要研究有记忆性能的材料、有极化性质的材料和有非局部性质的材料等的力学性质。为了描述这些力学性质，人们就要求大量使用泛函分析群论的方法。又例如：为了处理巨型的机械，特大的载荷和高速的运动，人们面对着大量的非线性问题。为了处理这些非线性问题，二十年来，力学界开发了奇异摄动理论的研究。又例如：计算机的发展，提供了力学原理直接用于工程上复杂结构强度计算的可能性，从而开创了近代的有限元理论，以及和有限元理论密切相关的广义变分原理。其它如嘉当张量之用于极化材料的分析，突变理论之用于处理稳定性问题，沃许函数之用于映象理论等，也无不如此。此外，随机过程和模糊数学等学科的发展，也正深刻地反映在力学原理处理真实生产问题的过程之中，从而使生产问题的处理更真实地反映了现实。

《应用数学和力学》讲座和讲座丛书，将尽可能地反映这种日新月异的发展情况。

《应用数学和力学》编委会谨藉丛书发行之际，向主讲的编委同志和编辑部的工作同志们致谢，由于他们的无私劳动和辛勤努力，讲座才能办成，丛书才得出版。

恳请读者不吝指数，对本丛书的任何意见，都将是对《应用数学和力学》编委会工作的支持和爱护。

钱伟长

一九八一年元月二十九日于北京清华园照澜院

前　言

计算物理学是物理科学的最新发展之一，是介于理论物理科学与实验物理科学之间的一个新分支．凡是局部瞬时的物理规律已知或已作为假设提出之后，则大范围长时间的物理规律便可依靠现代的大型快速计算机对物理过程进行模拟来得到．因此，计算物理学又可以简单地理解为用现代化的计算工具武装起来的理论物理科学，或形象化地描述为“纸面上的”实验物理科学．

这一物理科学的新分支，首先是由于军事科学研究与试验的需要，特别是第二次世界大战后期美国研究与试验核武器的需要，由洛斯阿拉莫斯实验室（Los Alamos Laboratory）的科学家们发展起来的．其后，它的应用遍及宇航、气象、海洋、地震、天体演化、基本粒子、化工过程、生物科学、医学科学等众多的方面，并正在日益发展．

计算物理学的发展又是和大型快速计算机的发展互相促进的．科学家冯·诺埃曼（von Neumann）为了解决核武器的计算问题而开辟了计算机科学这一重要领域，而大型快速计算机的出现与发展又反过来直接促进了计算物理科学的发展．这种相互促进的关系，现在已在更广泛的基础上飞速发展．

计算物理科学是一门现代化的科学分支，它常常是由一大批不同科目的科学工作者合作进行研究的学科．它需要物理学家、力学家、数学家、计算数学家、程序编制专家、上机计算和维护机器的专家等大批科技人员的集体工作，才能及时而有效地完成重大的科学任务．因此，从事计算物理学的工作还需要有人进行组织工作．

计算物理学工作的工序很长，包括物理问题的提出，物理模型的确定，参数的选取，计算方法的选取，计算程序的编制，计算机存储量及运行时间的安排，计算机的稳定运行，计算结果的加工处理，最后是物理规律的提取和物理结论的形成．因此，任何一个环节的差错都会直接影响到最后的物理规律的提取和物理结论的形成．为了控制这个长过程的顺利进行并保证结果的可靠性，除加强对每个环节的检查外，还需要平行地发展一个新的分支——近似解析解．它和计算机的数值计算结果又是相互促进的．

在我国的四化建设中，计算物理学由于国防建设、国民经济和基础科学的需要，也和大型快速计算机的发展而相互促进并迅速发展．

经过二十多年的工作实践，我们感到有必要将这些实践经验逐步提升到学科性理论的高度，从而更好地为四化建设服务．

这本书是一个集体劳动的产物．参加编著的同志有王贻仁、刘尊全、雷光耀、吴声昌、张锁春、常谦顺、管克英、李鲁平等．实际上，本书还包括了很多没有写上名字的同志的经验和劳动成果．对这些曾与我们长期共同工作过的同志，我们在此表示衷心的感谢．

今年夏天，应贵州省科学技术讲座和钱伟长教授主持的“应用数学和力学”讲座的邀请，我在贵州花溪主讲了“计算物理学”．许多同志感到这是一门新的能解决实际问题的分支学科，因而要求我们整理出版．承四川科学技术出版社的邀约，我们整理了讲稿，并增补了

内容，写成此书．为此特向贵州省科学技术讲座、"应用数学和力学"讲座及四川科学技术出版社的领导和同志们表示衷心的感谢。

秦元勋

一九八一年十一月于北京中国科学院应用数学研究所

目　　录

第三篇 计算物理学工作的实践与展望

第一篇　总　　论

第一章　计算物理学的特征

§1. 计算物理学初期发展简史

传统的物理科学（包括力学、天文学、物理学、化学等等）分为理论物理科学与实验物理科学两大分支．理论物理科学是从一系列的基本原理（例如质量守恒、能量守恒、动量守恒、角动量守恒、电荷守恒、万有引力规律、电荷的吸引与排斥规律、电磁感应规律等等）出发，经过数学的描述（主要是微分方程，此外也有其它的形式，如积分方程、微分积分方程、代数方程、统计形式等），并求出显式的解析解，进一步利用这些解析解的结果与实验和观测结果对比，用以解释已知的自然现象，并预测未来的发展．实验物理科学则以实验和观测为手段来发现新的物理现象，为理论物理科学提供新的理论规律的素材，并检验理论物理科学的推论的正确程度及使用范围等等．这两大分支相辅相成，共同推动物理科学蓬勃发展．

这方面的典型例子是天体力学中的行星运动规律的研究．首先，在人类数千年观测结果的基础上，特别是在地谷(Tycho)等人所积累的结果的基础上，刻卜勒总结出了经验性的行星运动三定律．牛顿在这个基础上进一步提升为理论上的万有引力规律，并创立了微积分和微分方程，用以描述一般的天体力学运动．关于行星的运动规律，则对二体问题（日、地关系，或地、月关系等等）作出了显式的解析解，用它解释了过去的行星运动规律，并且由勒维叶(Le Verrier)算出和由刻勒(Kelley)证实了海王星的存在．这是实验物理科学与理论物理科学相互促进的著名的发展史例．

然而，客观的自然现象是极其复杂的．在二体问题得到彻底解决即有了显式的解析解之后，便遇到了三体问题（例如日、地、月的相互运动）的困难．三体问题可以用十八维相空间中的常微分方程来描述．但是，这组方程的解除了已知的十个代数积分（能量守恒、动量守恒和角动量守恒）之外，没有找到其它的解析积分表达式，而解的存在性是已经证明了的．由于历算、航海、军事等的需要，必须计算月球运动的轨道．为此，除了发展微扰方法外，主要还是依靠对微分方程组的数值积分．这就表明了传统的理论物理科学在方法上的局限性．这也是科学发展史中一个著名的史例．由此，原始形式的计算物理学便开始了．

更进一步，许多物理科学的问题，用传统的理论物理科学和传统的实验物理科学的方法都是难于解决的，例如恒星演化的研究就是如此．以太阳为例，它已经用现在的方式燃烧了约四十亿年，它还要以现在的方式再燃烧六十亿年左右，然后发生质变，发热量减少，体积收缩，产生新的燃烧条件，再发热甚至爆发等等．显然，实验室无法容下一个太阳，也无法

对一个以十亿年为单位的星球演化现象作持续观测，只好借助于已有的观测结果作理论的推测．从理论的角度来看，这个问题牵涉到流体运动、核反应、粒子输运、辐射热传导、物态变化、万有引力的约束等方面．运动的方程组可以写出，但无法得出显式解析解．因此，传统的数学物理方法对这类问题是无能为力的．

当然，象恒星演化这类问题，虽然是科学发展的前沿课题，但还不是迫在眉睫必须限期解决的问题．人们可以暂时不去解决它．但是类似的问题却已经提到了必须立即解决的日程上．

例如，第二次世界大战中，美国在研制和试验核武器的过程中，就遇到与恒星演化相类似的问题．一方面，核武器要消耗大量的核材料（例如需要铀 235 五十公斤，这是当时美国核材料的生产水平所难于供应的），不能作多次试验．另一方面，这里牵涉到的物理过程与恒星演化过程中的新星爆发很相似(只是引力影响除外)，用传统的数学物理的方法是不能解这一大套方程组的．这就迫使当时在洛斯阿拉莫斯实验室工作的科学家们动用了数字计算机．

四十年代初期美国数字计算机的水平，以哈佛大学的 Mark—Ⅰ为例，每秒只能作三次加法运算，这是一台继电器式的计算机．但是，和人的手算比较，它不仅快速，而且还可以整天整月地持续进行工作．这台从今天的眼光看来水平极低的继电器式的计算机，却在美国原子弹研究的过程中起了重要的作用，以致在后来公开发表的洛斯阿拉莫斯实验室的历史中也为它写上了单独的一页，以记录它的贡献．

当时在洛斯阿拉莫斯实验室工作的科学家冯·诺埃曼迅速抓住这一刚刚出现而又有极大发展前途的科学苗头，在原子弹制成之后，离开了洛斯阿拉莫斯实验室，去到普林斯登高级研究所(Princeton Institute For Advanced Study)专门从事计算机原理和试制的工作．他奠定了现代电子计算机的理论基础，并指导制造出第一代电子管式的电子计算机，然后又将这一科技新成果直接用于支持美国氢弹研制的工作．

这样，物理与技术问题需要进行大型复杂的计算，推动了大型高速计算机的发展．大型高速计算机的发展反过来又促进了物理科学的新分支——计算物理学的产生和发展，使科学研究的方法也得到现代化．计算机的出现，不仅在科学研究中，而且在生产过程中，在管理工作中，都引起了划时代的飞跃．计算机工业已经成为一种新兴的战略工业．下面我们转到对计算机性能的简述．

§2. 计算机性能简介

为了应用计算机来解决物理科学与技术的问题，我们必须对计算机的一般性能有一个简明的了解．

人们利用工具例如算盘进行计算．算盘首先起一个存放数据的作用．当人用手拨动算盘珠进行运算时，算盘又起一个对数据进行运算加工的作用．但是控制整个过程的是人的大脑．大脑指挥手指从事数据存取（例如由纸上将数据拨到算盘上，计算完毕后，又写到纸上）和运算加工，并决定整个过程的开始、连续进行和终止．这样，人的大脑起了一个控制全过程的作用．

类似地，现代化的计算机的核心部分也是由控制器、运算器和存储器这三大部分所组成的．

控制器：控制数据的存入取出、运算加工和比较转移.

运算器：根据控制器的指令进行数据运算和数据比较.

存储器：存放计算所需用的数据和程序.

此外，在外部设备中，还需要加上输入设备（例如纸带机、读卡机、磁带机等等）和输出设备(例如打印机、图象显示、磁带机等等)，以及电源供应、空调设备等.

关于存储问题，平常我们习惯于应用十进制，这和古代人类利用十个手指进行计算是分不开的. 但在计算机的结构中是利用物质器件来记录数字的，例如利用电流的通或断，电门的开或关这种不同的状态，因而采用二进制对于计算机设计更加方便. 现代电子计算机均采用二进制. 但在输入输出的过程中，可将十进制与二进制互相转化，对于电子计算机的使用者而言仍可用十进制，而不管计算机内部的具体结构.

运算器的主要功能是作加法运算. 减法是加法的逆运算，乘法是加法的积累，而除法则是减法的积累即乘法的逆运算. 初等函数的计算是利用公式化的一系列加、减、乘、除运算来实现的，积分要化为乘积之和来进行运算，微商则是利用差商来逼近它，这是后面要详细研究的问题. 总之，在计算机上的一切运算都要化为加、减、乘、除来进行，但初等函数如三角函数、对数和指数等则已有子程序自动完成.

控制器是控制全部过程的核心. 它根据人给定的程序顺次发出指令，让运算器顺序进行运算并存取数据，此外它在一定的条件下还进行各种判断，即进行比较运算，根据比较的结果决定下一步应当转移到程序的哪一条指令. 这种比较和转移的功能使得计算机不仅可以作数值计算，而且也可以作逻辑运算. 这样，计算机便具有极大的适应性和广阔的应用范围. 除了进行数值计算外，计算机还在非数值计算方面得到广泛的应用，又一门新兴的学科——人工智能便产生和迅速发展起来.

从上面的叙述看来，计算机的功能不过是初等运算和初等判定的组合，那么它为什么会产生重大的影响呢？这主要是由它的巨大的速度和巨大的存储量所引起的. 由Mark—Ⅰ的每秒三次加法的低速发展到每秒亿次运算的高速，从庞大的房间里所装的机器压缩到火柴盒大小的口袋中的装置，这种高速度和大存储量使得它所能解决的问题的范围发生了质变.

下面，我们又再回到本书的主题上来.

§3. 计算物理学的特征

从原则上说，凡是局部瞬时的物理规律为已知，或已被作为假设，要由局部的联系组合成大范围的联系，由瞬时的规律发展为长期的规律，都可以利用计算机来进行模拟. 具体地说，大范围的数据靠计算机的大存储量来记录，瞬时过程积累为长期过程靠计算机的高速运算来模拟. 这样，通过现代计算机的大存储量和高速运算，人们便可以从已知的或已假设的局部瞬时的物理规律，得出在大范围的长时间的物理现象的变化过程. 这便是计算物理学要进行工作的领域.

注意到曲线可以用折线来逼近，非线性的问题也可以用大量局部瞬时的线性问题的组合来逼近，而这些大量的局部瞬时的线性问题又可以用计算机来模拟. 因此，对古典研究方法中望而生畏的非线性问题，计算物理学则能得心应手，应付自如. “非线性”和”线性”，“变系数”和“常系数”这些传统概念间的不可逾越性，在现代大型高速计算机的面前消失了. 正

因为如此，计算物理学在过去四十年中得到了巨大的发展．下面我们来看一下计算物理学取得显著成就的若干物理科学与技术的主要领域．

首先，以天体力学为例．二体问题(包括行星运动三定律)已为牛顿在三百年前解决了，但是三体问题（日、地、月或是地、月、登月飞船的相互位置）的显式求解到今天还是没有解决．从局部瞬时的物理规律看来，这里牵涉到的只是牛顿运动定律和牛顿万有引力定律．这些规律都是已知的，方程组是早已列出的，问题只在于求解．因此，这是一个计算物理学可以起重要作用的领域．事实上，登月飞船的轨道以及一般的导弹的轨道选取和及时控制，都是通过快速计算机来进行的．历史上海王星的发现便是通过计算找出行星的一个著名史例．天体力学是计算物理学取得显著成就的一个领域．

其次，以流体力学为例．这里包括空气动力学、水力学、气象学、海洋学等等，牵涉到的局部瞬时的物理学规律是三个守恒定律（质量守恒、能量守恒和动量守恒）以及物质状态方程（压强、温度和密度的关系）．这些局部瞬时的物理规律都是已知的，但是由于初始条件和边界条件的不同，情形千变万化，这组偏微分方程的定解问题是无穷无尽的．许多著名的流体力学家在这些方程组的求解上花了大量的精力，并发展了很多种求近似解析解的方法(例如 Poincaré-Lighthill-郭永怀方法)．但从原则上说，这些劳动中相当大的一部分是可以利用电子计算机来进行的．这就可以为力学家们节省出大量的精力和时间，用以从事力学的本质研究．气象部门大量应用大型快速计算机便是明显的例子．流体力学是计算物理学取得显著成就的另一个领域．

再以中子输运为例．在原子反应堆的设计与运行过程中，要研究千千万万个中子在反应堆中的输运过程．这些中子与特定的原子核发生碰撞的概率，碰撞之后可能产生的散射、吸收及引起裂变的概率，以及裂变后产生若干中子的概率，都是局部瞬时的物理规律．这些规律都是通过实验已经得出了的．在这些概率参数给定之后，反应堆内的中子输运过程便可以用中子守恒方程来描述，具体地可写成一个微分积分方程——Boltzmann 方程．由于反应堆的整体作用的特点，由于堆内物质的分布不同，由于复杂的边界条件，要解这种微分积分方程是极其困难的．但是，由于局部瞬时的物理规律已知，因而要求出全局和长期的物理过程，这正是计算物理学的研究领域．反应堆的计算都大量使用计算机．原子能工业是计算物理学取得重大成就的又一个领域．

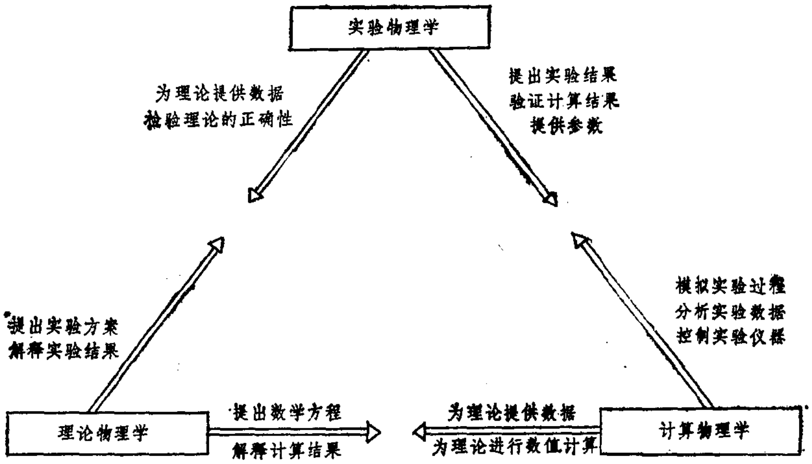
再次以扩散过程为例．这里牵涉到热的传导，粒子的扩散等等．只要将扩散系数或导热系数测定之后，这种局部瞬时的过程便可以用扩散方程来描述．由于外源的影响，边界的影响，导热系数与温度的变化关系的影响，这里需要处理非线性的扩散过程．这类问题一般只能用计算物理学的方法来求解．化学反应动力学是计算物理学取得显著成就的又一个领域．

再以电磁场为例．电磁场的运动规律由麦克斯韦方程(Maxwell field equation) 来描述，场中带电粒子的运动也已描述了．因此，有关电磁场的运动以及场中带电粒子的运动便是计算物理学处理的对象．等离子体物理也是计算物理学取得显著成就的领域之一．

我们不能逐一列举这些领域．许多重大科技问题都是综合性很强的课题，例如天体物理学、受控热核反应等等都牵涉到许多物理过程，包括流体运动、粒子输运、热传导、核反应、电磁效应、重力影响等等．但是只要局部瞬时的物理规律已知，极其复杂的过程也可以利用大型快速计算机来进行过程模拟，并求出大范围长时间的发展过程．

由上面的介绍，我们可以形象化地说，计算物理学是"纸上的"实验物理学，是用现代大型快速计算机武装起来的理论物理学．

理论物理学、实验物理学和计算物理学这三大分支是相辅相成的，它们的相互关系也可用下面的图来说明．



在许多尖端技术部门和重大试验工作中，计算物理学已经成为不可缺少的关键组成部分．因此，应充分发挥这一新兴学科的作用，总结、发展和普及这一学科，为四化建设服务．

参 考 文 献

[1] 秦元勋，计算物理学概述，中国科学院应用数学研究推广办公室，(1978)．

[2] Potter, D., *Computational Physics*, (1973).

[3] Richtmyer, R. and K. W Morton, *Difference Methods for Initial-Value Problems*, (1967).

第二章　差分格式的建立与要求

在计算物理中遇到的大都是比较复杂的微分方程或微分-积分方程．它们主要的数值解法是差分方法，即在空间和时间两个方向上将问题离散化为差分方程，然后从初始条件出发，按时间逐层推进．这种方法有高度的通用性，而它的公式又是程式化了的，便于在电子计算机上用程序实现，因此也叫做差分格式．本章中我们叙述构造差分格式的基本方法和对于差分格式的基本要求．

§1. 构造差分格式的基本方法

（1） 通过数值微分的方法建立差分格式

建立差分格式最直接的方法是从微分方程出发，将每个微分项用适当的差商来代替，从而得到差分方程．这种方法比较简单，对于差分格式的形式可以直接控制，是一种常用的方法，特别是对双曲型方程和抛物型方程用得更多．

下面我们以单波方程为例来说明这种方法、方程和定解条件是

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t}=a\dfrac{\partial u}{\partial x} & t>0,\ x\in(0,1),\ a>0 \quad (2.1.1) \\ u|_{x=0}=0 & t\geqslant 0 \quad (2.1.2) \\ u|_{t=0}=u_0(x) & x\in(0,1) \quad (2.1.3) \end{cases}$$

对于 x 的区间[0,1]，我们以步长Δx 将其等分为J份，$\Delta x=\dfrac{1}{J}$ 分点$x_0=0$，$x_1=\Delta x,\cdots$，$x_j=j\cdot\Delta x$，$\cdots$，$x_J=J\cdot\Delta x=1$．对于时间变量t，我们以步长Δt逐步向前推进，第n排的时刻为$t=n\cdot\Delta t$．这样就把问题的定解区域化为离散的格网，这是将微分方程离散化为差分方程的基础．未知函数$u(x,t)$有无穷多个自由度，为了进行数值求解，我们只能计算有限次，因此只能考虑未知函数在格网节点处的值，这些值是

$$u_j^n=u(j\Delta x,\ n\Delta t) \qquad j=0,1,\cdots,J;\ n=0,1,2,\cdots$$

这样便把无穷多个自由度的问题化为有限多个自由度的问题．然后再对微分方程和定解条件建立差分格式．差分格式的形式很多，这里只用两种简单而又常用的格式来说明．一种是对（2.1.1）中各个微分项作如下形式的逼近：

$$\left.\frac{\partial u}{\partial t}\right|_j^n\sim\frac{1}{\Delta t}(u_j^{n+1}-u_j^n)$$

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_j^n\sim\frac{1}{\Delta x}(u_{j+1}^n-u_j^n)$$

将它们代入（2.1.1）中则得到差分格式

$$\begin{cases} u_j^{n+1}=u_j^n+\dfrac{a\cdot\Delta t}{\Delta x}(u_{j+1}^n-u_j^n) & j=1,2\cdots,J-1 \quad (2.1.4) \\ u_0^n=0 & n=0,\ 1,\ \cdots \quad (2.1.5) \\ u_j^0=u_0(x_j) & j=1,\ 2,\ \cdots,\ J-1 \quad (2.1.6) \end{cases}$$

这是一种常用的格式，有时称为迎风格式．另一种差分格式是对（2.1.1）中各个微分项逼近如下

$$\left.\frac{\partial u}{\partial t}\right|_j^n\sim\frac{1}{\Delta t}\left[u_j^{n+1}-\frac{1}{2}\left(u_{j+1}^n+u_{j-1}^n\right)\right]$$

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_j^n\sim\frac{1}{2\cdot\Delta x}(u_{j+1}^n-u_{j-1}^n)$$

将它们代入到（2.1.1）中得到差分格式

$$\begin{cases} u_j^{n+1}=\dfrac{1}{2}(u_{j+1}^n+u_{j-1}^n)+\dfrac{a\cdot\Delta t}{2\cdot\Delta x}(u_{j+1}^n-u_{j-1}^n) & j=1,2,\cdots,J-1 \quad (2.1.7) \\ u_0^n=0 & n=0,1,\cdots \quad (2.1.8) \\ u_j^0=u_0(x_j) & j=1,2,\cdots,J-1 \quad (2.1.9) \end{cases}$$

这种格式也是常用的，称为Lax 格式．

建立差分格式以后，我们就把原来的微分方程化为代数方程组．这样能够从$n=0$出发一排一排地向前计算，在每一排计算中只要解一个代数方程组，使得问题能够在电子计算机上

算出结果来．

（2） 从积分形式的守恒律出发建立差分格式

在计算物理中求解的微分方程常常是反映物理上的某种守恒律，如质量守恒，动量守恒，能量守恒，粒子数守恒等．因此有时为了方便我们可以不从微分方程出发，而从守恒律的积分形式出发来建立差分格式，这时随着积分路径的不同和网格量的取法不同可以得到各种各样的差分格式．我们仍然以单波方程为例来说明这种方法．

现在考虑 x-t 平面上的区域（如图 2.1）．将方程（2.1.1）在G上积分得到

$$\iint_G \left(\frac{\partial u}{\partial t}-a\frac{\partial u}{\partial x}\right)dxdt=0$$

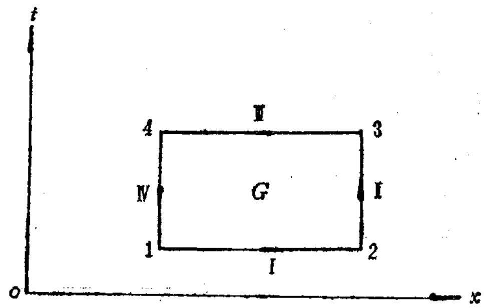


图2.1 积分区域图

利用Green公式得

$$\oint(un_t-aun_x)ds=0 \qquad \vec{n}\text{ 为外法线方向单位向量}$$

对上式可以近似为

$$-u_{\mathrm{I}}\Delta x-au_{\mathrm{II}}\Delta t+u_{\mathrm{III}}\Delta x+au_{\mathrm{IV}}\Delta t=0$$

即

$$u_{\mathrm{III}}=u_{\mathrm{I}}+\frac{a\Delta t}{\Delta x}(u_{\mathrm{II}}-u_{\mathrm{IV}}) \tag{2.1.10}$$

具体的差分格式的形式取决于在定解区域的离散网格中点1，2，3，4如何选取，以及在边Ⅰ，Ⅱ，Ⅲ，Ⅳ上函数值 u_{I}，u_{II}，u_{III}，u_{IV} 怎样确定．为了说明方法我们考虑下述一种选取法：取点1为$\left(n-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}\right)$，点2为$\left(n-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}\right)$，点3为$\left(n+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}\right)$，点4为$\left(n+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}\right)$．函数值确定为（见图2.2）：

$$u_{\mathrm{I}}=\frac{1}{2}(u_j^n+u_j^{n-1})$$

$$u_{\mathrm{II}}=\frac{1}{2}(n_j^n+u_{j+1}^n)$$

$$u_{\mathrm{III}}=\frac{1}{2}(u_j^n+u_j^{n+1})$$

$$u_{\mathrm{IV}}=\frac{1}{2}(u_j^n+u_{j-1}^n)$$

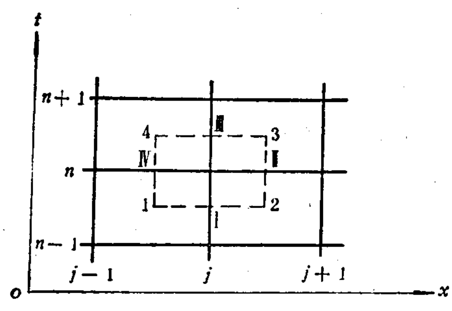


图2.2 Leap-frog格式示意图

将各个u值代入到（2.1.10）中去得到差分格式是

$$u_j^{n+1}=u_j^{n-1}+\frac{a\cdot\Delta t}{\Delta x}(u_{j+1}^n-u_{j-1}^n)$$

这是一个常用的格式称为Leap-frog格式．

利用守恒律的积分形式来构造差分格式，虽然比直接从微分方程来构造差分格式复杂一

些，但是它比较容易得到守恒形式的差分格式，这是一个优点．另一方面当我们采用的网格比较复杂时直接从微分方程来构造差分格式就很困难，并且容易出错，而从积分形式的方程来构造差分格式对复杂的网格并没有什么特别的困难，所以这种方法也是一种很基本的构造差分格式的方法．

（3） 有限元方法

这是六十年代后期发展起来的一种新方法，它将传统的 Ritz-Galerkin 方法和计算机上所适用的差分方法结合起来．Ritz-Galerkin 方法是利用预先选定的“基元”函数族对解作逼近，主要工作是计算展开式系数，这由计算机来完成．对于椭圆型方程已有比较系统的理论和实践．对于抛物型的偏微分方程有限元方法也有大量的应用．

我们以热传导方程的第一边值问题为例来说明．定解问题是

$$\begin{cases} Lu\equiv\dfrac{\partial u}{\partial t}-\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}=f(x,t) & 0<x<l,\quad t>0 \\ u|_{t=0}=u_0(x) & 0\leqslant x\leqslant l \\ u(0,t)=u(l,t)=0 & t\geqslant 0 \end{cases} \tag{2.1.11}$$

为了用有限元法解此问题，令时间变量 t 暂时固定，对空间变量x来离散化．用 $m+1$ 个点x_0，x_1，…，x_m（等距或不等距）将区间$[0,\ l]$分割为m个子区间 $[x_{i-1},\ x_i]$，$i=1,2,\cdots,m$，即所谓“基本元”，其中$x_0=0$，$x_m=l$，并要求这些基本元互不重迭．

在每个基本元上构造$y(x)$的线性插值函数．假定$y(x)$在$x=x_{i-1}$，x_i点的值分别为y_{i-1}，y_i，其线性插值函数为

$$y^{(i)}(x)=\frac{x_i-x}{x_i-x_{i-1}}y_{i-1}+\frac{x-x_{i-1}}{x_i-x_{i-1}}y_i$$

此函数在点 $x=x_i$ 上有$y^{(i)}(x_i)=y_i$，并且在相邻两个基本元的公共结点上保持连续．把每一个基本元上的函数$y^{(i)}(x)$合并起来就得到在整个区间$[0,\ l]$上都有定义的函数$y_m(x)$：

$$y_m(x)=y^{(i)}(x)\qquad 当x\in[x_{i-1},\ x_i],\quad i=1,2,\cdots,m$$

对于任意一个连续函数来说，这样构造的分块近似函数就是以折线表示的函数．把这些分块近似函数的全体表示为$D_0^{(m)}$．

可以把函数$y_m(x)$表示为 Ritz 方法的形式，即表示为坐标函数系的线性组合．现在定义坐标函数系$\varphi_i(x)$：

$$\varphi_i(x)=\begin{cases} \dfrac{x-x_{i-1}}{x_i-x_{i-1}} & x\in[x_{i-1},\ x_i] \\ 1 & x=x_i \\ \dfrac{x_{i+1}-x}{x_{i+1}-x_i} & x\in[x_i,\ x_{i+1}] \\ 0 & x\bar{\in}[x_{i-1},x_{i+1}] \end{cases}$$

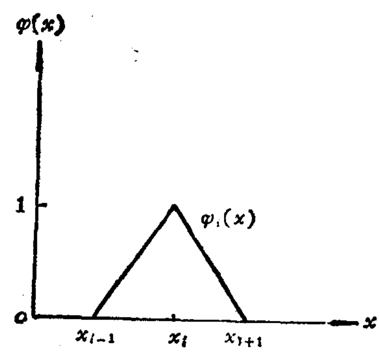


图2.3 “屋顶”函数

这是“屋顶”函数（见图2.3）．

于是

$$y_m(x)=\sum_{i=1}^{m-1}y_i\varphi_i(x)$$