偏微分方程的有限差分方法

张 强 编著

科 学 出 版 社

偏微分方程的有限差分方法

张 强 编著

科 学 出 版 社
北 京

内 容 简 介

本书以抛物型方程、双曲型方程和椭圆型方程为基本模型，系统地阐述有限差分方法的基础理论和主要格式。在详细介绍每个格式的时候，一些重要的数值设计思想和理论分析技术得到详尽的讨论，有限差分方法同其他数值方法的联系与区别也得到简要的论述。本书既注重理论的严谨性，也关注算法的实现细节；内容既注重历史的发展轨迹，也关注最新的研究进展。

本书可作为信息与计算专业的本科生教材，也可作为应用数学专业的本科生辅导教材。同时，本书也可供理工科其他专业的研究生、教师以及从事科学计算的科研工作者参考。

图书在版编目（CIP）数据

偏微分方程的有限差分方法/张强编著. —北京：科学出版社, 2017.12
ISBN 978-7-03-055378-2

Ⅰ. ①偏…　Ⅱ. ①张…　Ⅲ. ①偏微分方程-有限差分法-研究　Ⅳ. ①O241.82

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2017) 第 280515 号

责任编辑：胡　凯　许　蕾　曾佳佳／责任校对：彭　涛
责任印制：张　伟／封面设计：许　瑞

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

北京中石油彩色印刷有限责任公司印刷
科学出版社发行　各地新华书店经销

2017 年 12 月第　一　版　开本: 787 × 1092　1/16
2017 年 12 月第一次印刷　印张: 15
字数: 353 000

定价: 59.00 元

(如有印装质量问题，我社负责调换)

前　言

数学物理和工程科技中的诸多问题，常常可以描述为某个微分方程的定解问题。真解的理论刻画或者具体计算，自然成为首要的研究任务。通常，真解的解析表达式是难以精确建立的，除非问题本身过于简单或者具有某种特殊结构。因此，数值 (近似) 计算是理所当然的选择之一。事实上，常微分方程的数值方法可以追溯到 18 世纪，偏微分方程的数值方法也可以追溯到 20 世纪初期。然而，它真正成为一门理论严谨且实用有效的学科，却是在 20 世纪 50 年代以后，特别是当电子计算机成为主要的计算工具以后。同时，各种科学理论和工程技术的快速发展，也为微分方程数值方法的蓬勃发展，提供了重要的客观条件。时至今日，数值工作者已经收获了相当丰富的研究结果，相继建立了各具特色的数值方法，例如有限差分方法、有限体积方法、有限元方法、配置方法和谱方法等。

作为偏微分方程数值解法的入门教材，本书将以常见的三类偏微分 (抛物型、双曲型和椭圆型) 方程为主要研究对象，深入浅出地介绍有限差分方法的基本思想和主要技术。有限差分方法具有简洁和直观等优点，相应的数值技巧和基本概念也极具代表性。在上述过程中，本书还会简要地介绍同有限差分方法密切相关的有限体积方法和有限元方法。在内容安排方面，本书力争做到自成体系，既要兼顾数值格式的基本理论和实现细节，还要注重历史文献的挖掘和发展方向的跟踪。本书将以各种简单的实例问题为模型，希望各种相关概念的论述既严谨又易于接受。

本书适合大学本科的高年级学生，可作为信息与计算专业、应用数学专业相关课程的教材。当然，本书也可供相关专业的研究生、教师以及从事科学计算的科研工作者参考。读者需要具备基本的高等数学知识，熟悉 Taylor 级数、Fourier 理论和数学物理方程的基本理论；读者需要接触过基础的数值方法，熟悉矩阵范数、数值积分和数值差商等基本概念；当然，读者还需要掌握基本的计算机编程语言。

本书曾在南京大学试讲过多次，它的出版得到各方面的支持。感谢南京大学数学系课程建设基金的鼎力资助；感谢厦门大学数学学院邱建贤教授认真审阅书稿，南京大学数学学院计算专业各位同仁提出的宝贵意见，赵彦普博士提供的文献资料以及各届学生的理解和支持；感谢科学出版社许蕾女士的辛勤付出。最后，借本书出版之际，向我的老师孙澈教授和舒其望教授表示衷心的感谢，他们在我的学业研究中给予了指导和帮助。

由于作者水平有限，书中定有疏漏和不妥之处，敬请读者批评指正。

张　强

2017 年 8 月于南京

目 录

前言
绪论 …… 1
0.1 数值方法研究的必要性 …… 1
0.2 内容和结构 …… 3
第 1 章 两个简单格式 …… 6
1.1 古典格式 …… 6
1.1.1 格式构造 …… 6
1.1.2 可行性和效率 …… 9
1.1.3 数值表现 …… 11
1.2 简单推广 …… 14
1.3 总结 …… 16
习题 …… 16
第 2 章 线性差分格式的基本理论 …… 18
2.1 预备知识 …… 18
2.2 相容性 …… 20
2.2.1 逐点相容性 …… 20
2.2.2 整体相容性 ‡ …… 22
2.2.3 导数的差商离散 …… 23
2.3 稳定性 …… 26
2.4 Fourier 方法 …… 32
2.4.1 理论背景 ‡ …… 32
2.4.2 操作过程 …… 35
2.5 收敛性 …… 38
2.5.1 基本概念 …… 39
2.5.2 Lax-Richtmyer 等价定理 …… 40
习题 …… 41
第 3 章 热传导方程 …… 43
3.1 相容性 …… 43
3.1.1 加权平均格式 …… 43
3.1.2 三层格式 …… 47
3.2 计算效率 …… 53
3.2.1 时间步长的轮替策略 …… 53
3.2.2 显隐格式的交替使用 …… 54

3.2.3 Saul'ev 格式及其应用 58
3.3 误差估计或收敛分析 61
3.3.1 基于强正则性假设 61
3.3.2 弱正则性假设 ‡ 63
3.4 导数边界条件 66
3.4.1 单侧离散方式 67
3.4.2 双侧离散方式 70
3.4.3 数值表现 72
3.5 初值条件的离散 ‡ 73
习题 75
第 4 章　一维扩散方程 77
4.1 具有光滑系数的线性扩散方程 77
4.1.1 非守恒型扩散方程 77
4.1.2 守恒型扩散方程 79
4.1.3 稳定性分析方法 82
4.2 具有间断系数的线性扩散方程 86
4.3 极坐标下的热传导方程 ‡ 88
4.4 非线性扩散方程 91
习题 93
第 5 章　高维扩散方程 95
5.1 微分方程的数值离散 95
5.2 边界条件的数值离散 98
5.2.1 矩形区域 99
5.2.2 任意区域 101
5.2.3 高维格式的计算效率 106
5.3 分数步长方法 107
5.3.1 交替方向隐式方法 107
5.3.2 局部一维化方法 113
5.3.3 注释和说明 114
习题 116
第 6 章　线性常系数对流方程 119
6.1 迎风格式和 Lax-Wendroff 格式 119
6.1.1 迎风格式 119
6.1.2 Lax-Wendroff 格式 121
6.1.3 稳定性分析方法 122
6.1.4 数值表现 124
6.2 线性常系数差分格式 126
6.2.1 基本数值概念 127

6.2.2 单调格式与数值振荡 ······ 128
6.2.3 数值耗散、数值频散和数值振荡 ······ 129
6.3 其他著名格式 ······ 133
6.3.1 Lax-Friedrichs 格式 ······ 133
6.3.2 蛙跳格式 ······ 135
6.3.3 盒子格式 ······ 138
6.4 人工边界条件‡ ······ 141
习题 ······ 143
第 7 章 线性双曲型方程 ······ 145
7.1 线性变系数对流方程 ······ 145
7.2 一阶双曲型方程组 ······ 148
7.3 二阶声波方程 ······ 150
7.3.1 直接离散方式 ······ 150
7.3.2 间接离散方式 ······ 151
7.3.3 哈密顿系统和辛格式‡ ······ 153
7.4 高维对流方程 ······ 155
习题 ······ 157
第 8 章 非线性双曲守恒律 ······ 159
8.1 弱解和熵解 ······ 159
8.2 守恒型差分格式 ······ 162
8.2.1 基于光滑解的格式构造 ······ 162
8.2.2 关于间断解的健壮性 ······ 167
8.3 有限体积方法 ······ 169
8.3.1 基本框架 ······ 169
8.3.2 Godunov 方法‡ ······ 173
8.4 稳定性和收敛性 ······ 177
8.4.1 单调保持格式 ······ 178
8.4.2 单调格式 ······ 178
8.4.3 TVD 格式 ······ 179
8.5 TVD 修正技术‡ ······ 181
8.5.1 数值通量修正技术 ······ 181
8.5.2 数值斜率修正技术 ······ 182
习题 ······ 184
第 9 章 发展型方程差分方法综述 ······ 185
9.1 对流扩散方程 ······ 185
9.1.1 中心差商显格式 ······ 185
9.1.2 常用的解决方法 ······ 187
9.2 修正方程方法‡ ······ 191

9.3 能量方法 ‡ ······ 193
习题 ······ 196
第 10 章 椭圆型方程 ······ 198
10.1 五点格式 ······ 198
10.1.1 规则内点的五点差分方程 ······ 198
10.1.2 非规则内点的五点差分方程 ······ 199
10.1.3 离散方程组 ······ 200
10.1.4 线性方程组的数值解法 ‡ ······ 201
10.2 最大模估计 ······ 205
10.2.1 强最大值原理 ······ 205
10.2.2 简单估计 ······ 206
10.2.3 精细估计 ······ 207
10.3 提高数值精度的方法 ······ 209
10.3.1 Richardson 外推技术 ······ 209
10.3.2 九点格式 ······ 210
10.3.3 Kreiss 差分格式 ······ 210
10.4 有限元方法 ‡ ······ 211
10.4.1 变分方法的基本理论 ······ 212
10.4.2 古典变分法 ······ 214
10.4.3 标准有限元方法 ······ 216
习题 ······ 219
主要参考文献 ······ 221
附录 ······ 222
A Taylor 级数 ······ 222
B Fourier 级数 (积分) ······ 222
C 周期函数的离散 Fourier 理论 ······ 222
D 线性差分方程的基本理论 ······ 223
E 三对角矩阵的特征值 ······ 224
F Gronwall 不等式 ······ 225
G 圆盘定理 ······ 225
部分习题答案和提示 ······ 226
索引 ······ 228

绪　论

0.1　数值方法研究的必要性

自微积分理论诞生以来，偏微分方程① 一直发挥着非常重要的作用，广泛地出现在气象预报、海洋流动、环境治理、油田开发、飞机制造、航天计算、武器研究、量子碰撞、水坝建设、交通设计、生物科学、股票期权等领域，用于描述、解释或者预见各种自然现象、社会现象和科学工程问题。下面给出一个简要列表。

(1) 热力学理论包含大量的抛物型方程，例如典型的热传导方程

$$u_t = a\triangle u,$$

其中 $a>0$，是扩散系数。它描述了热量的扩散和衰减过程。

(2) 流体力学理论包含大量的双曲型方程，例如典型的对流方程

$$u_t + \boldsymbol{a}\cdot\nabla u = 0$$

和声波方程

$$u_{tt} = a^2\triangle u,$$

其中 $\boldsymbol{a}$ 和 a 是流场速度。前者刻画了单向波的传播现象，后者刻画了双向波的传播现象。

(3) 静力学理论包含大量的椭圆型方程，例如典型的二阶 Poisson 方程

$$-\triangle u = f,$$

其中 f 是已知的外力，u 是相对平衡位置的位移。它描述了塑性材料 (板梁壳) 的扭曲变形现象。当 $f=0$ 时，它也称为 Laplace 方程或者调和方程。

(4) 非线性双曲守恒律是基本的流体力学方程，可以展现出流体运动的激波或稀疏波等现象。典型的例子有 Burgers 方程

$$u_t + \left(\frac{1}{2}u^2\right)_x = 0$$

和交通流方程

$$u_t + \left[\frac{1}{2}u(1-u)\right]_x = 0.$$

(5) 三维空间可压流体的无黏流动现象可以描述为 Euler 方程组

$$\rho_t + \boldsymbol{v}\cdot\nabla\rho = 0,\quad \text{(质量守恒)}$$

①若待解函数仅仅含有一个自变量，则微分方程是常微分方程；否则，它是偏微分方程。为行文简便，本书将它们统称为偏微分方程。若微分方程同时间相关，称其为发展型的；否则，称其为稳态的。

$$\rho \boldsymbol{v}_t + \rho \boldsymbol{v} \cdot \nabla \boldsymbol{v} + \nabla p = 0, \quad (\text{动量守恒})$$

其中密度 $\rho = \rho(x, y, z)$ 和流场速度 $\boldsymbol{v} = (v_1, v_2, v_3)$ 是待解函数，而压强 p 满足已知的本构方程 $p = p(\rho)$。

(6) 设 ρ 是流体密度，η 是流体黏性系数。三维空间不可压流体的有黏流动现象可以描述为 Navier-Stokes 方程组

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \boldsymbol{v} &= 0, \quad (\text{质量守恒}) \\ \rho \boldsymbol{v}_t + \rho \boldsymbol{v} \cdot \nabla \boldsymbol{v} + \nabla p &= \eta \triangle \boldsymbol{v}, \quad (\text{动力学规律}) \end{aligned}$$

其中压强 $p = p(x, y, z)$ 和流场速度 $\boldsymbol{v} = (v_1, v_2, v_3)$ 是待解函数。

(7) Korteweg-de Vries 方程

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

是著名的非线性数学物理方程。它同浅水波方程密切相关，可以描述孤立波的运动规律。

(8) 三维空间的电磁波动现象可以描述为 Maxwell 方程

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \boldsymbol{B} &= 0, \quad (\text{静磁定律}) \\ \boldsymbol{B}_t + \operatorname{curl} \boldsymbol{E} &= 0, \quad (\text{动磁定律}) \\ \operatorname{div} \boldsymbol{E} &= 4\pi\rho, \quad (\text{静电定律，其中 } \rho \text{ 是电荷密度}) \\ \boldsymbol{E}_t - \operatorname{curl} \boldsymbol{E} &= -4\pi j, \quad (\text{动电定律，其中 } j \text{ 是电流强度}) \end{aligned}$$

其中磁场强度 $\boldsymbol{B} = (B_1, B_2, B_3)$ 和电场强度 $\boldsymbol{E} = (E_1, E_2, E_3)$ 是待解函数。

(9) 单个粒子通过给定电场的运动规律可以描述为 Schrödinger 方程

$$\sqrt{-1}\hbar u_t = -\frac{\hbar^2}{2m} \triangle u + V(x, u),$$

其中 m 是粒子质量，$\hbar$ 是 Planck 常数，V 是已知的势陷。它在量子力学中具有重要地位。

(10) 在微分几何理论中，Monge-Ampère 方程

$$u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2 = f$$

和最小曲面方程

$$(1 + u_y^2)u_{xx} - 2u_x u_y u_{xy} + (1 + u_x^2)u_{yy} = 0$$

都是重要的完全非线性问题。

因此说，偏微分方程的求解技术是备受关注的研究内容。然而，能够精确解出的偏微分方程堪称凤毛麟角。只有当偏微分方程具有某些特定结构时，我们才能利用相应的求解技术，精确地解析表达问题的通解，或者某些指定情形的特解。通常，上述求解过程是较为烦琐的，解析表达式呈现出级数或者积分形式。当级数的收敛速度极其缓慢，或者积分没有显式表达的原函数时，利用解析表达式计算大量时空位置的函数值，并不是高效的解决方案。

事实上，更多偏微分方程的真解不具备解析表达式。因此，数值计算成为必然的选择。随着计算机技术的蓬勃发展，简单便捷的数值求解越来越受到重视。时至今日，偏微分方程数值方法已经成为一门独立学科。

偏微分方程的数值方法并不简单。数值格式常常呈现出意想不到的数值现象，需要系统深入地观察和研究。特别地，利用位长有限的计算机作为计算工具，数值结果要受到方法误差和舍入误差的双重影响，其可靠程度将成为不可回避的问题。数值方法不仅需要精心的设计和深入的分析，还要经历数值论证和实践检验。随着科学技术的不断进步，数值计算的范围越来越广，数值计算的目标也越来越高。面对计算数据急剧膨胀带来的严峻挑战，偏微分方程的数值方法也要与时俱进。只有具有更高的快捷性、准确性和分辨率，数值方法才能够解决复杂多变的各种实际问题。要实现上述目标，我们不能完全寄望于计算机硬件性能的提高，还需投入巨大的精力和热情，构造同当前计算环境相匹配的高效算法。

0.2 内容和结构

有限差分方法具有悠久的历史。早在 1928 年，著名学者 Courant、Friedrichs 和 Lewy 就已经建立了差分方法的完整论述。直到计算机诞生之后，通过 von Neumann、O'Brien、Hyman、Kaplan 和 John(1946~1952 年) 等学者的不懈努力，差分方法才真正奠定相对完善的理论框架。时至今日，有限差分方法已经得到长足的发展，成为偏微分方程的重要求解方法之一。

有限差分方法的思想非常简单，就是利用局部的有限个离散点信息，近似偏微分方程的各种函数及其导数。作为入门教材，本书将以常见的抛物型、双曲型和椭圆型方程为例，详细介绍相关的各种经典差分格式，阐述差分方法的主要概念和基本技术。具体内容安排如下：

(1) 前两章是第一部分，快速浏览差分方法的基本实现过程，抽象出相关的理论概念和分析技术。

(a) 第 1 章考虑一维线性常系数热传导方程。就三个简单的模型问题，我们将基于朴素的导数差商离散技术，建立相应的两个古典格式，即全显格式和全隐格式。尽管结构简单，但它们的数值实现过程和数值表现已经充分地展示出差分方法的基本内容。

(b) 第 2 章以古典格式为范本，抽象出差分格式的基本结构，即双层格式。三个重要的数值概念依次介绍如下：

(i) **相容性**概念用于展现数值格式的逼近程度，主要通过**局部截断误差**来体现。利用简单的 Taylor 展开技术，局部相容阶是容易确定的。

(ii) **稳定性**概念用于刻画数值格式的"适定性"，可以展现数值解关于定解数据的连续依赖关系。本章将重点介绍两种稳定性分析技术，其一是基于离散最大模原理的最大模稳定性，其二是基于 Fourier 级数 (或者积分) 理论的 L^2 模稳定性。

(iii) **收敛性**概念是数值方法研究的核心目标，用于描述差分格式的数值解同问题真解的逼近程度。相比于相容性和稳定性两个概念，它是最难分析的。通常借用 Lax-Richtmyer 等价定理，由相容性结论和稳定性结论直接导出收敛性结论。

(2) 接下来的三章是第二部分，继续介绍扩散方程的差分方法。相关内容涵盖 Crank、

Douglas、Lees、Nicolson、Samarskii 和 Widlund 等著名学者的贡献。

(a) 第 3 章仍以一维线性常系数热传导方程为例，介绍差分方法在数值精度、稳定性、计算效率、误差分析、初边值离散技术等方面的进展。

(b) 第 4 章考虑一维线性变系数 (或者非线性) 扩散方程。尽管非定常的扩散系数导致某些困难，差分格式依旧具有灵活性和有效性。在格式构造方面，我们将介绍系数冻结方法、积分插值方法和局部线性化方法。在理论分析方面，我们将重点介绍冻结系数方法和能量方法两种稳定性分析技术。

(c) 第 5 章考虑二维线性常系数扩散方程。虽然偏微分方程离散不会遇到本质困难，但是边界条件离散和整体计算效率将会出现严重困扰。

(3) 后续三章是第三部分，转向双曲型方程的差分方法。相关内容涵盖 Engquist、Friedrichs、Harten、Lax、Leer、Osher 和 Wendroff 等著名学者的贡献。

(a) 第 6 章考虑一维线性常系数对流方程。我们将介绍著名的迎风格式、Lax-Wendroff 格式、Lax-Friedrichs 格式、蛙跳格式和盒子格式。极具特色的理论概念包括单调格式、数值耗散和数值色散、CFL 方法和数值黏性方法。

(b) 第 7 章考虑线性双曲型问题。关于线性变系数的对流方程，我们将强调指出稳定性方面造成的数值风险；关于线性常系数双曲型方程组，我们将指出矩阵特征分解的数值意义；关于二阶声波方程，我们将介绍两种不同的离散方式及其差分格式，并指出高阶时间导数引起的稳定性概念变化；关于高维对流方程，我们将重点指出空间维数带来的数值困难。

(c) 第 8 章考虑一维非线性双曲守恒律。真解常常具有复杂多变的光滑性表现，相应的数值模拟会遇到更加严峻的挑战：数值格式既要高精度地模拟光滑部分，还要合理地刻画强间断界面 (激波) 的移动速度。我们将介绍守恒型格式的理论框架，阐述有限体积 (包括 Godunov) 方法的设计思路。在这个过程中，我们将指出有限体积方法同有限差分方法的紧密联系，介绍单调保持格式、单调格式、Godunov 定理、全变差不增 (TVD) 格式、高分辨率格式和非线性 TVD 修正技术。在非线性双曲守恒律的数值方法研究中，上述内容都是具有里程碑意义的工作。

(4) 第 9 章是第四部分。作为发展型方程差分方法的终结篇，就某些数值问题给予相应的总结和补充。首先，以对流占优扩散方程为代表，我们将强调指出差分格式的“强稳定性”概念，并介绍一些有效的高效格式。其次，我们将系统介绍两种稳定性分析技术，即修正方程 (Hirt 启发式) 方法和能量方法。

(5) 第 10 章是本书的最后部分，以二维 Poisson 方程的 Dirichlet 定解问题为例，集中介绍椭圆型方程的差分方法及相关概念。

(a) 以五点差分格式为起点，重点阐述三个关键问题：

(i) 随着网格的加密，离散而成的代数方程组不仅规模变大，而且病态程度越发严重。我们将简要介绍交替方向方法、多重网格方法和区域分解方法。它们的实现均基于微分方程的数值离散，是非常高效的代数求解器。

(ii) 利用椭圆型差分格式的强最大值原理，建立最优的最大模误差估计。换言之，即使采用粗糙的离散方式处理 Dirichlet 边界条件，五点差分格式的最大模误差依旧达到二阶。

(iii) 数值精度的提升，可以改善格式的计算效率。首先，利用强最大值原理，建立五点差

分格式的误差渐近展开式，构造相应的 Richardson 外推方法；其次，扩大离散版本的宽度，构造高阶的差分格式；最后，基于 Kreiss 离散方式，构造可以快速求解的高阶紧凑格式。

(b) 同差分方法相比，有限元方法可以克服区域形状和边界条件带来的数值困难。它基于古典变分方法和分片多项式理论，在某种程度上可以视为一种具有特殊结构的有限差分方法。

带有 ‡ 的章节都是选读内容。若课时紧张，可以直接跳过。

第1章

两个简单格式

由简单的模型问题入手。设 $T>0$ 是给定的终止时刻，考虑一维热传导方程的 Dirichlet 边值问题 (HD):

$$u_t = au_{xx} + f(x,t), \quad (x,t) \in (0,1) \times (0,T], \tag{1.1a}$$

其中扩散系数 $a>0$ 是给定常数，$f(x,t)$ 是已知源项。相应的定解条件是初值

$$u(x,0) = u_0(x), \quad x \in [0,1], \tag{1.1b}$$

和边值

$$u(0,t) = \phi_0(t),\ u(1,t) = \phi_1(t), \quad t \in (0,T], \tag{1.1c}$$

其中 $u_0(x), \phi_0(t)$ 和 $\phi_1(t)$ 都是已知函数。由偏微分方程的经典理论可知，模型问题 (HD) 是适定的，即真解 $u(x,t)$ 唯一存在，且连续依赖于定解数据。在适当的条件下，真解 $u(x,t)$ 是充分光滑的，其任意阶导数都是连续有界的。

用分离变量方法处理齐次问题，用 Duhamel 原理处理右端项，模型问题 (HD) 的真解可以用公式准确地表达。但是，上述推导过程具有三个缺点。其一，扩散系数必须是常数，适用范围有限；其二，推导过程较为烦琐；其三，公式通常是函数级数或者函数卷积，不适宜大量位置的函数值计算。因此，我们希望建立简单、快捷、普适的求解技术，可以借用高效的计算工具，机械化地给出真解的合理近似。

基于上述思路，有限差分方法是相当自然的选择。本章重点讨论模型问题 (HD) 的全显格式和全隐格式。它们堪称最简单的差分格式，统称为古典格式。其设计思想非常朴素，就是利用有限差商离散导数。古典格式的结构相对简单，数值表现具有严格的理论证明，可以清晰展现差分方法的基本目标和相关概念。

1.1 古 典 格 式

本节介绍两个古典格式的构造过程，并探讨它们的实现过程和具体表现。

1.1.1 格式构造

格式构造通常包括计算区域的离散、微分方程的离散和定解条件的离散。在三个设计步骤中，微分方程的离散最为关键。

1. 计算区域的离散

在差分方法中，数值操作均基于某种结构的**离散网格**。对于模型问题 (HD) 而言，图 1.1

展示的等距时空网格①

$$\mathcal{T}_{\Delta x,\Delta t}=\left\{(x_j,t^n):x_j=j\Delta x,t^n=n\Delta t\right\}_{j=0:J}^{n=0:N} \tag{1.2}$$

是最常用的，其中 $\Delta x=1/J$ 称为**空间步长**，$\Delta t=T/N$ 称为**时间步长**，N 和 J 是给定的正整数。它由分别平行于空间轴和时间轴的两个直线 (段) 族交叉而成，具有笛卡儿乘积型结构。平行于坐标轴的直线 (段) 称为网格线，网格线的交点称为网格点。

注释 1.1 等距时空网格，是指同族的平行网格线具有相同间隔。事实上，网格线 $x=x_j$ 和 $t=t^n$ 可以疏密相间。相邻空间网格线 (垂直线) 的间距称为局部空间步长，即

$$\Delta x_j=x_j-x_{j-1},\quad j=1:J,$$

相应的最大值称为空间步长，记为 $\Delta x=\max\limits_{j=1:J}\Delta x_j$。类似地，相邻时间网格线 (水平线) 的间距称为局部时间步长，即

$$\Delta t^n=t^n-t^{n-1},\quad n=1:N,$$

相应的最大值称为时间步长，记为 $\Delta t=\max\limits_{n=1:N}\Delta t^n$。

基于非等距时空网格，数值格式的设计思想是类似的，但是表达方式和理论分析都将变得更加复杂。为简单起见，本书默认时空网格 $\mathcal{T}_{\Delta x,\Delta t}$ 都是等距的。

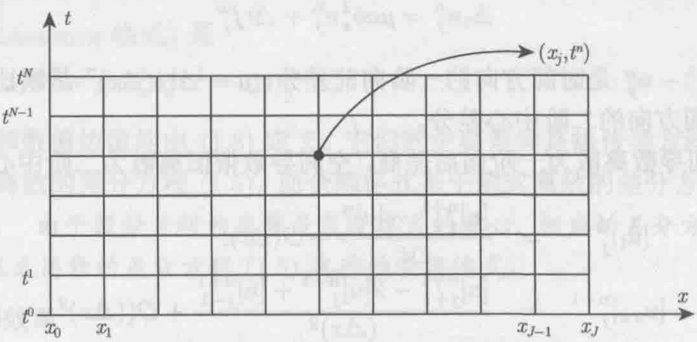

图 1.1 模型问题 (HD) 的矩形网格

将真解 $u(x,t)$ 限制在离散网格 $\mathcal{T}_{\Delta x,\Delta t}$ 上，相应的离散数据集合

$$\left\{[u]_j^n=u(x_j,t^n)\right\}_{j=0:J}^{n=0:N} \tag{1.3}$$

是差分方法的数值逼近目标。换言之，差分方法要在每个网格点 (x_j,t^n) 上，建立 $[u]_j^n$ 的近似值 u_j^n。通常，称近似解为数值解。

为实现上述目标，我们需要离散偏微分方程和初边值条件。换言之，基于时空网格 $\mathcal{T}_{\Delta x,\Delta t}$，设计出适当的数值格式和操作流程，把 (依赖连续型变量的) 微分方程定解问题转化为相应的 (依赖离散型变量的) 代数问题。

①设 $A\leqslant B$ 是两个整数，符号 $A:B$ 表示从 A 到 B 的所有整数。

2. 微分方程的离散

设真解 $[u]$ 足够光滑，使得以下陈述均合法。利用 Newton 差商理论或者 Taylor 展开公式，可得①

$$[u_t]_j^n = \frac{[u]_j^{n+1} - [u]_j^n}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t), \tag{1.4a}$$

$$[u_{xx}]_j^n = \frac{[u]_{j+1}^n - 2[u]_j^n + [u]_{j-1}^n}{(\Delta x)^2} + \mathcal{O}((\Delta x)^2). \tag{1.4b}$$

换言之，时间导数离散为一阶向前差商，空间导数离散为二阶中心差商。由于热传导方程 (1.1a) 在网格点 (x_j, t^n) 上精确成立②，有

$$\frac{[u]_j^{n+1} - [u]_j^n}{\Delta t} - a\frac{[u]_{j+1}^n - 2[u]_j^n + [u]_{j-1}^n}{(\Delta x)^2} = f_j^n + \mathcal{O}((\Delta x)^2 + \Delta t),$$

其中 $f_j^n = f(x_j, t^n)$ 是已知信息，$j = 1 : J-1$ 和 $n = 0 : N-1$。略去无穷小量，用数值解替换真解，可得 (1.1a) 的差分方程

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} - a\frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2} = f_j^n. \tag{1.5a}$$

通常，将差分方程 (1.5a) 等价变形为③

$$\Delta_t u_j^n = \mu a \delta_x^2 u_j^n + \Delta t f_j^n, \tag{1.5b}$$

其中 $\Delta_t u_j^n = u_j^{n+1} - u_j^n$ 是时间方向的一阶向前差分，$\mu = \Delta t/(\Delta x)^2$ 是网比，$\delta_x^2 u_j^n = u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n$ 是空间方向的二阶中心差分。

类似地，时间导数离散为一阶向后差商，空间导数依旧离散为二阶中心差商，得到

$$[u_t]_j^{n+1} = \frac{[u]_j^{n+1} - [u]_j^n}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t), \tag{1.6a}$$

$$[u_{xx}]_j^{n+1} = \frac{[u]_{j+1}^{n+1} - 2[u]_j^{n+1} + [u]_{j-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} + \mathcal{O}((\Delta x)^2). \tag{1.6b}$$

注意到热传导方程 (1.1a) 在网格点 (x_j, t^{n+1}) 处精确成立，仿照前面的设计流程，可得差分方程

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} - a\frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} = f_j^{n+1}, \tag{1.7a}$$

或者等价的

$$\Delta_t u_j^n = \mu a \delta_x^2 u_j^{n+1} + \Delta t f_j^{n+1}. \tag{1.7b}$$

在差分方程中出现的网格点集，称为**离散模板**。参见图 1.2，差分方程 (1.5) 和 (1.7) 的离散模板具有不同的结构。前者称为**显式离散**的，因为离散模板的顶端只含一个网格点值，

①符号 $\mathcal{O}(\eta)$ 的含义是指：存在某个 η_0，使得当 $0 < \eta < \eta_0$ 时有 $|\mathcal{O}(\eta)| \leqslant C\eta$，其中界定常数 $C > 0$ 同 η 无关。

②由于真解足够光滑，热传导方程在初始时刻也成立。

③Schmidt E. *Über die Anwendung der Differenzenrechnung auf technische Anheizund Abkühlungsprobleme.* Beiträge zur Technichen Mechanik und Technischen Physik. Springer Berlin Heidelberg, 1924: 179-189.

可以直接解出；后者称为**隐式离散**的，因为离散模板的顶端同时含有三个网格点值，必须要多个差分方程耦合起来才能解出。

全显离散 (1.5)　　全隐离散 (1.7)

图 1.2　离散模板

3. 定解条件的离散

对于模型问题 (HD) 而言，定解条件的离散是非常简单的，只需在相应网格点上直接赋值即可。具体来说，数值初值可以定义为

$$u_j^0 = u_0(x_j), \quad j = 0 : J, \tag{1.8a}$$

数值边值可以定义为

$$u_0^n = \phi_0(t^n), \quad u_J^n = \phi_1(t^n), \quad n = 1 : N. \tag{1.8b}$$

4. 全显格式和全隐格式

将出现的差分方程汇总起来，即可建立模型问题 (HD) 的两个古典格式。基于等距时空网格 (1.2)，**全显格式**是

$$\Delta u_j^n = \mu a \delta_x^2 u_j^n + \Delta t f_j^n, \quad j = 1 : J-1,\ n = 0 : N-1, \tag{1.9}$$

全隐格式 (或者 Laasonen 格式) 是

$$\Delta_t u_j^n = \mu a \delta_x^2 u_j^{n+1} + \Delta t f_j^{n+1}, \quad j = 1 : J-1,\ n = 0 : N-1, \tag{1.10}$$

相应的数值初值和数值边值均由 (1.8) 定义。它们的主要差异是热传导方程的离散方式，全显格式基于显式离散的差分方程 (1.5)，而全隐格式基于隐式离散的差分方程 (1.7)。

注释 1.2　*由于微分方程的离散是差分格式的核心，相应的差分方程常常被称为差分格式。例如，显式离散的差分方程 (1.5) 也称为全显格式。*

1.1.2　可行性和效率

出于对数据存储和计算效率的考量，发展型偏微分方程的数值计算常常采用逐层推进的策略。若单步时间推进仅仅涉及两个相邻时间层，则差分格式称为双层格式。显然，古典格式就是双层格式。

数值格式可以实际应用的前提条件是它具有足够理想的可行性。换言之，数值解要存在且唯一，计算过程要具有计算机上的可操作性。由于初值的设置是显而易见的，我们只需利用数学归纳法回答下面的问题：已知 $t = t^n$ 时刻的数值解，能否明确给出 $t = t^{n+1}$ 时刻的数值解？其答案同数值格式的实现过程相关。

全显格式 (1.9) 是显然的，而全隐格式 (1.10) 需要讨论。按照空间下标的自然顺序，将位于同一时间层的 (主要) 数值解信息排列起来，定义相应的列向量[①]

$$u^n = (u_1^n, u_2^n, \cdots, u_{J-1}^n)^{\mathrm{T}}, \quad n = 0 : N. \tag{1.11}$$

①差分方法称其为空间网格函数。在程序编程的时候，它对应一维数组。