有限差分法

计算物理b
高阳

背景

- 一维常微分方程

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + f(x)\frac{d\phi}{dx} + g(x)\phi = h(x)$$

- 例子：有阻尼的简谐振动

- 高维偏微分方程（二维或三维）

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} + p(x,y)\frac{\partial\phi}{\partial x} + q(x,y)\frac{\partial\phi}{\partial y} + V(x,y)\,\phi = h(x,y)$$

- 例子：泊松方程

- 也可含时，如扩散方程

思路(1)

- （1）连续变离散：在待解区域D中做网格分化，并标记其中的网格点；将求解$\phi(x,y)$转换为求解ϕ_i
- （2）微分变差分：核心就是泰勒展开。以一维为例：

若待解区间是[a,b]，将其均匀的分割，记x_j是其中的某个格点，其左边点x_{j-1}与右边点x_{j+1}与其间隔均为h,则

$$\phi(x_{j+1}) = \phi(x_j) + \phi'(x_j)\,h + \frac{1}{2}\phi''(x_j)\,h^2 + \frac{1}{6}\phi^{(3)}(x_j)\,h^3 + \frac{1}{24}\phi^{(4)}(x_j)\,h^4 + O(h^5)$$

$$\phi(x_{j-1}) = \phi(x_j) - \phi'(x_j)\,h + \frac{1}{2}\phi''(x_j)\,h^2 - \frac{1}{6}\phi^{(3)}(x_j)\,h^3 + \frac{1}{24}\phi^{(4)}(x_j)\,h^4 + O(h^5)$$

从而有

$$\phi'(x_j) = \frac{\phi(x_{j+1})-\phi(x_j)}{h} + O(h) = \frac{\phi(x_j)-\phi(x_{j-1})}{h} + O(h)$$

$$= \frac{\phi(x_{j+1})-\phi(x_{j-1})}{2h} + O(h^2)$$

未知数与方程数目匹配可依次消除高阶误差，但不一定是最好的。

二阶偏导

- 一维

$$\phi''(x_j) = \frac{\phi(x_{j+1}) + \phi(x_{j-1}) - 2\phi(x_j)}{h^2} + O(h^2)$$

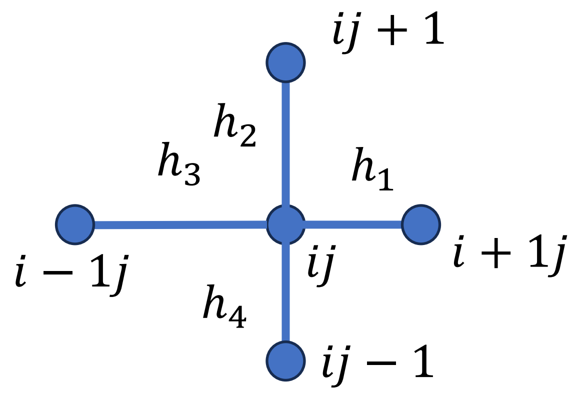
- 二维：均匀分割

$$\nabla^2\phi = \frac{\phi_1+\phi_2+\phi_3+\phi_4-4\phi_0}{h^2} + O(h^2)$$

- 如果两条分割线有夹角呢?

  方程数目不够，无法确定

不均匀分割



- 如何确定差分格式?
- 考察x方向

$$\phi_{i+1j} = \phi_{ij} + \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{ij} h_1 + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_{ij} h_1^2 + \frac{1}{6}\left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right)_{ij} h_1^3 + O\left(h_1^4\right)$$

$$\phi_{i-1j} = \phi_{ij} - \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{ij} h_3 + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_{ij} h_3^2 - \frac{1}{6}\left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right)_{ij} h_3^3 + O\left(h_3^4\right)$$

- 加权并组合

$$\alpha\left(\phi_{i+1j} - \phi_{ij}\right) + \beta\left(\phi_{i-1j} - \phi_{ij}\right) = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{ij} (\alpha h_1 - \beta h_3) + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_{ij} \left(\alpha h_1^2 + \beta h_3^2\right) + \frac{1}{6}\left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right)_{ij} (\alpha h_1^3 - \beta h_3^3)$$

- 对一阶偏导的差分格式

向前 $\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{ij} = \frac{\phi_{i+1j} - \phi_{ij}}{h_1} + O(h_1)$

向后 $\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{ij} = \frac{\phi_{ij} - \phi_{i-1j}}{h_3} + O(h_3)$

中间差分格式

- 加权式

$$\alpha\left(\phi_{i+1j}-\phi_{ij}\right)+\beta\left(\phi_{i-1j}-\phi_{ij}\right)=\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{ij}(\alpha h_1-\beta h_3)+\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_{ij}(\alpha h_1^2+\beta h_3^2)+\frac{1}{6}\left(\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right)_{ij}(\alpha h_1^3-\beta h_3^3)$$

- 选择系数使得二阶偏导项前系数为零:

$$\alpha h_1^2+\beta h_3^2=0\Rightarrow\ \alpha=-\beta\frac{h_3^2}{h_1^2}$$

- 忽略掉三次项，得到一阶偏导的差分格式

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{ij}=\frac{\alpha\left(\phi_{i+1j}-\phi_{ij}\right)+\beta\left(\phi_{i-1j}-\phi_{ij}\right)}{(\alpha h_1-\beta h_3)}=\frac{h_3^2\left(\phi_{i+1j}-\phi_{ij}\right)-h_1^2\left(\phi_{i-1j}-\phi_{ij}\right)}{h_1h_3(h_1+h_3)}+O(h_1h_3)$$

- 同理，可处理二阶偏导，此时应使得一阶项前系数为零

$$\alpha h_1-\beta h_3=0$$

$$\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_{ij}=\frac{2}{\alpha h_1^2+\beta h_3^2}\left[\alpha\left(\phi_{i+1j}-\phi_{ij}\right)+\beta\left(\phi_{i-1j}-\phi_{ij}\right)\right]=\frac{2\left[h_3\left(\phi_{i+1j}-\phi_{ij}\right)+h_1\left(\phi_{i-1j}-\phi_{ij}\right)\right]}{h_1h_3(h_1+h_3)}+O(h_1-h_3)$$

在$h_1=h_3$时皆可退回到之前的形式与精度。

完整格式

- 以如下方程为例

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}+V(x,y)\,\phi=h(x,y)$$

- 一般情形

$$\frac{2[h_3(\phi_{i+1j}-\phi_{ij})+h_1(\phi_{i-1j}-\phi_{ij})]}{h_1h_3(h_1+h_3)}+\frac{2[h_4(\phi_{ij+1}-\phi_{ij})+h_2(\phi_{ij-1}-\phi_{ij})]}{h_2h_4(h_2+h_4)}+V_{ij}\phi_{ij}=h_{ij}$$

- 假设方形区域，x方向和y方向各自是均匀分割，格点间距分别为h_x和h_y：

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}=\frac{\phi_{i+1j}+\phi_{i-1j}-2\phi_{ij}}{h_x^2}+\frac{\phi_{ij-1}+\phi_{ij+1}-2\phi_{ij}}{h_y^2}$$

- 完整格式

$$\frac{\phi_{i+1j}+\phi_{i-1j}-2\phi_{ij}}{h_x^2}+\frac{\phi_{ij-1}+\phi_{ij+1}-2\phi_{ij}}{h_y^2}+V_{ij}\,\phi_{ij}=h_{ij}$$

边条件

- 一般的边条件

$$\phi|_{\partial D} + g_1(s)\frac{\partial \phi}{\partial n}|_{\partial D} = g_2(s)$$

- 第一类边条件（Dirichlet问题）：

$$\phi|_{\partial D} = g(s)$$

- 第二类边条件（Neumann问题）：

$$\frac{\partial \phi}{\partial n}|_{\partial D} = g(s)$$

- 第三类边条件（混合问题）： $g_1(s) \neq 0,\ g_2(s) \neq 0$

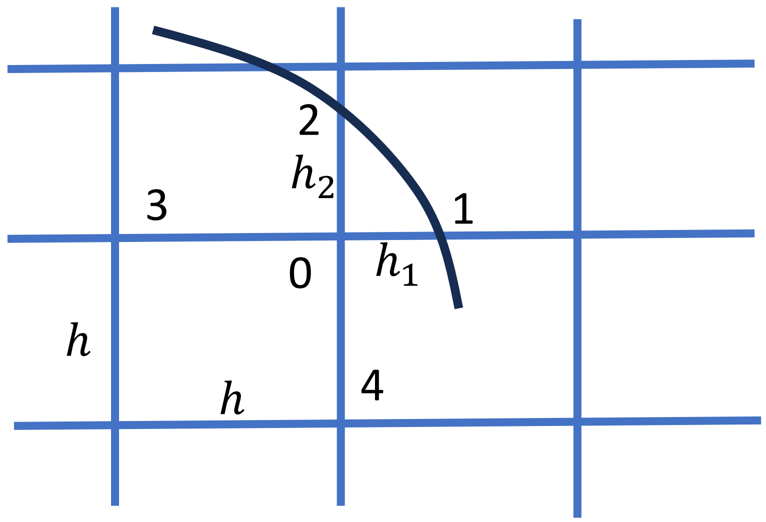
边界处理I

- 背景：边界不与分割线重合，使得边界上没有（或有很少）格点
- 核心：以某种方式用到边界上的给定函数值
- 第一类边条件（函数赋值型）
- 方法一：直接转移

  若$h_1 < h_2$，$\phi_0 = \phi_1$(注：$\phi_1 = g(s_1)$)

  反之，$\phi_0 = \phi_2$(注：$\phi_1 = g(s_2)$)
- 方法二：线性插值

  若$h_1 < h_2$，将0作x方向的插值



利用中间差分格式：$\alpha(\phi_1 - \phi_0) + \beta(\phi_3 - \phi_0) = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_0 (\alpha h_1 - \beta h) + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_0 (\alpha h_1^2 + \beta h^2)$

此时，我们的目的不是在0的偏导，而是0处的函数值本身，所以令$\alpha h_1 - \beta h = 0$即可

$$\phi_0 = \frac{\alpha\phi_1 + \beta\phi_3}{\alpha+\beta} + O\left(\frac{\alpha h_1^2 + \beta h^2}{\alpha+\beta}\right) = \frac{h\phi_1 + h_1\phi_3}{h+h_1} + O(hh_1)$$

边界处理II

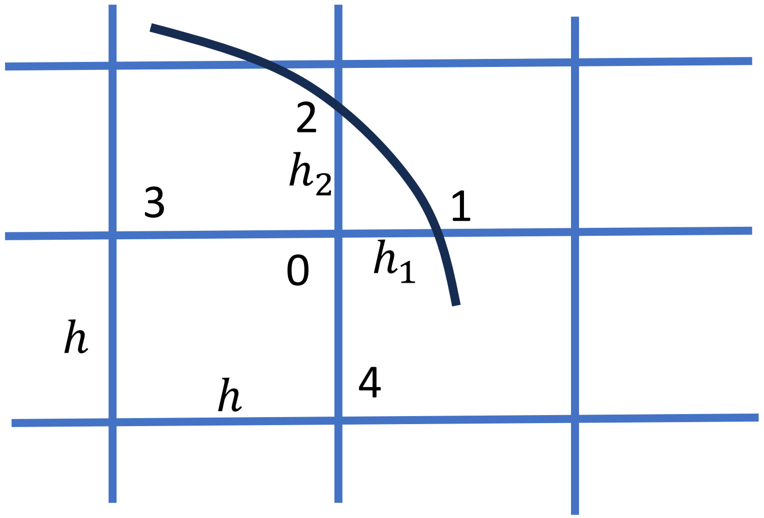
- 双向插值：利用不均匀差分格式

$$\frac{2[h_3(\phi_{i+1j}-\phi_{ij})+h_1(\phi_{i-1j}-\phi_{ij})]}{h_1h_3(h_1+h_3)}+\frac{2[h_4(\phi_{ij+1}-\phi_{ij})+h_2(\phi_{ij-1}-\phi_{ij})]}{h_2h_4(h_2+h_4)}+V_{ij}\phi_{ij}=h_{ij}$$

- 代入$h_3=h_4=h$

$$\frac{2}{h_1(h_1+h_3)}\phi_1+\frac{2}{h_3(h_1+h_3)}\phi_3+\frac{2}{h_2(h_2+h_4)}\phi_2+\frac{2}{h_4(h_2+h_4)}\phi_4$$
$$-\left(\frac{2}{\mathrm{h}_1\mathrm{h}_3}+\frac{2}{\mathrm{h}_2\mathrm{h}_4}\right)\phi_0+V_0\phi_0=h_0$$

- 进一步可令$h_1=\alpha h, h_2=\beta h$ 做化简



- 双向插值利用了原方程。为何这种方式误差更低?
- 考虑如下例子

已知$y(x=0)=0$， $y(x=0.1)=0.001$，求$y(x=0.05)$

（1）线性插值 $y(x=0.05)=\frac{0.001-0}{0.1-0}*0.05=5*10^{-4}$

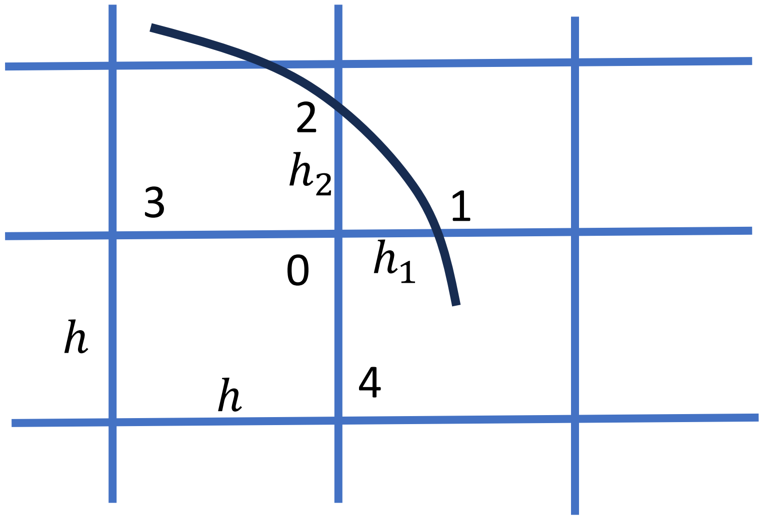
（2）若额外知道y满足的微分方程为$x\frac{dy}{dx}=3y$， 则$y(x=0.05)=\frac{0.001}{0.1}*0.05*\frac{1}{3}=1.67*10^{-4}$

这个微分方程的解实际为$y=x^3$，故真实值为$y(x=0.05)=1.25*10^{-4}$

确实更精确了，原因：当知道微分方程之后，同样的斜率近似可额外获得高阶导数信息。

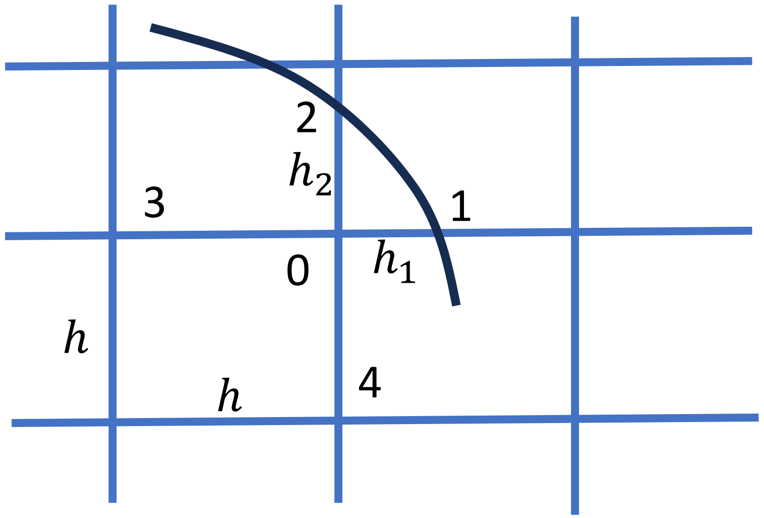
边界处理III

- 双向插值原因：原方程
  $$\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}+V(x,y)\,\phi=h(x,y)$$
  单向插值的格式
  $$\alpha(\phi_1-\phi_0)+\beta(\phi_3-\phi_0)=\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_0(\alpha h_1-\beta h)+\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_0(\alpha h_1^2+\beta h^2)$$
  条件$\alpha h_1-\beta h=0$
- 若能进一步获得$\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_0$的值，显然误差会更小
- 而此二阶偏导可结合原方程关联至当地的函数值上
  $$\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}=-V(x,y)\phi+h(x,y)$$



重访随机游走法

- 离散化方程$\phi = P\phi + A$
- 1. 对于矩阵P：考虑p_{ij}其中i不在边界上，则$p_{ij} = 1/4$或0：
- 2.对于矩阵P：考虑p_{ij}其中i在边界上，则$p_{ij} = 0$
- P是转移矩阵



- 对于复杂边条件,若i是不紧邻边界的点，则无变化
- 若i是紧邻边界的点，如此时的0点，考察双向差分格式

  仍假设泊松方程，也即V(x,y)=0

$$\phi_0 = -\frac{h_0}{2}\frac{h_1h_2h_3h_4}{h_1h_3+h_2h_4} + \alpha\phi_1 + \beta\phi_2 + \gamma\phi_3 + \delta\phi_4$$

$$\alpha = \frac{h_2h_3h_4}{(h_1+h_3)(h_1h_3+h_2h_4)},\quad \beta = \frac{h_1h_2h_4}{(h_1+h_3)(h_1h_3+h_2h_4)},\quad \gamma = \frac{h_1h_3h_4}{(h_2+h_4)(h_1h_3+h_2h_4)}$$

$$\delta = \frac{h_1h_2h_3}{(h_2+h_4)(h_1h_3+h_2h_4)}$$

可检验 $\alpha + \beta + \gamma + \delta = 1$

- 仍然可写出转移矩阵！ 只是此行的矩阵元不再是1/4和0，而是α， β ,γ ，δ和0
- 仍然可以用随机游走的方法，走到边界停止即可。

边界处理：2类和3类

- 第二类与第三类边条件

  $$\left(\frac{\partial\phi}{\partial\hat{n}}+\alpha\phi\right)|_{\partial D}=g$$

  关键是获得对法向偏导的近似
- 方法一：直接转移法

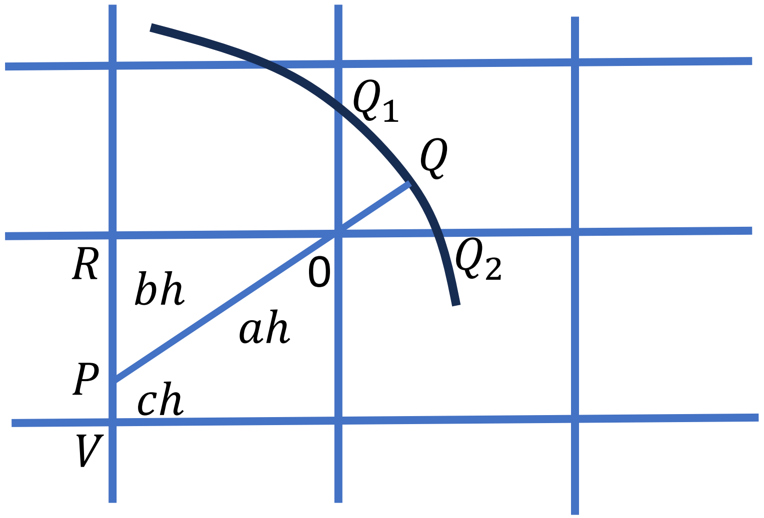
  $$\frac{\partial\phi}{\partial n}|_Q=\frac{\partial\phi}{\partial n}|_O+O(h)$$
- 从O向线段Q_1Q_2做垂线，可用解析方法获得垂足Q的坐标。
- 反向延伸垂线，与网格交于P点。
- 获得O点的偏导：利用P点的函数值做单向差分格式

  $$\frac{\partial\phi}{\partial n}|_O=\frac{\phi_O-\phi_P}{ah}+O(h)$$ （注意减号的左右，要算向外偏导）
- P点函数值：插值

  $$\phi_P=c\phi_R+b\phi_V+O(h^2)$$
- 最终获得

  $$\frac{\partial\phi}{\partial n}|_Q=\frac{1}{ah}(\phi_O-c\phi_R-b\phi_V)+O(h)$$
- 进一步用ϕ_O近似ϕ_Q（为何？），则可获得如下方程

  $$\frac{1}{ah}(\phi_O-c\phi_R-b\phi_V)+\alpha(Q)\phi_O=g(Q)$$



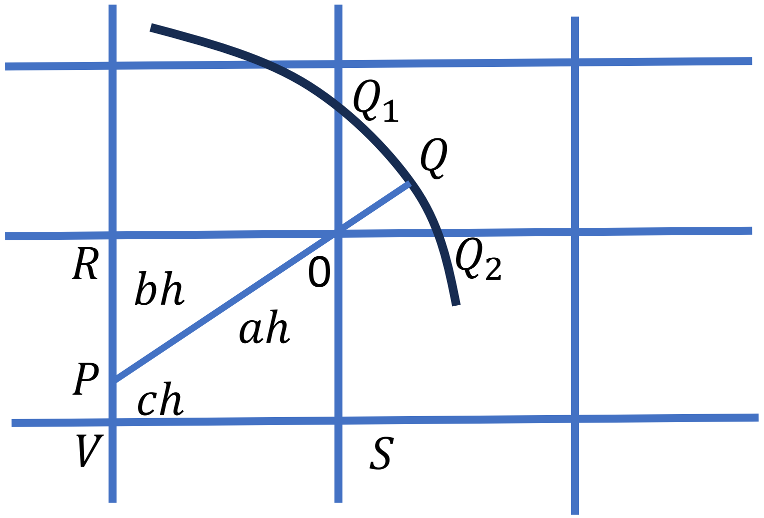
边界处理：特殊情形

- 若Q_1Q_2与网格线平行，比如与y方向平行，则P点与R点重合
- 则

$$\frac{\partial\phi}{\partial n}|_O = \frac{\phi_O-\phi_P}{ah} + O(h) = \frac{\phi_O-\phi_R}{h} + O(h)$$

- O点的完整差分格式为

$$\frac{1}{h}(\phi_O-\phi_R)+\alpha(Q)\phi_O = g(Q)$$



- 若Q_1Q_2与网格线平行，比如与y方向平行，则P点与S点重合

$$\frac{\partial\phi}{\partial n}|_O = \frac{\phi_O-\phi_P}{ah} + O(h) = \frac{\phi_O-\phi_S}{h} + O(h)$$

- O点的完整差分格式为

$$\frac{1}{h}(\phi_O-\phi_S)+\alpha(Q)\phi_O = g(Q)$$

边界处理：积分法I

- 思考：在第一类中，利用微分方程的双向插值法精度较高，如何在第二和第三类中利用？
- 以第二类为例：可用积分法

- 考察如图所示的一个简单情形，其余情况可以此类推。
- K为方形OBCS的中心点，从其出发向上与向右做网格垂线，交点已标记
- 原方程为

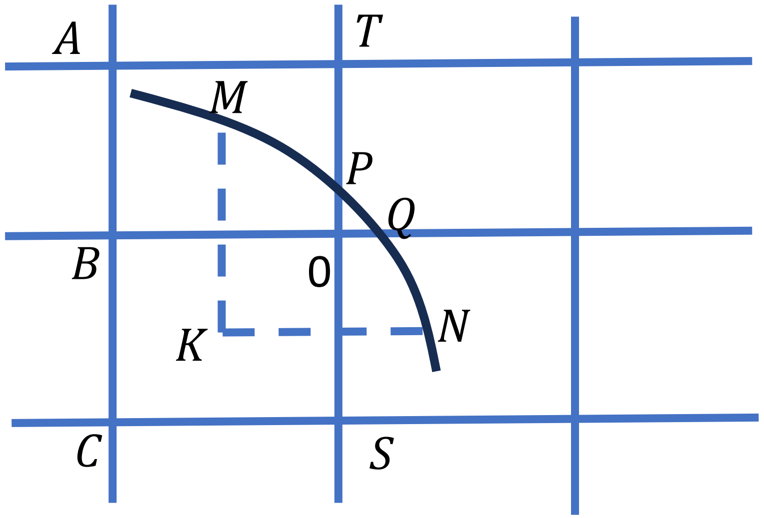
$$\nabla^2\phi = -V(x,y)\phi + h(x,y)$$

- 在弧形三角形MKN中（或者多边形MKNQPM中)，根据高斯定理

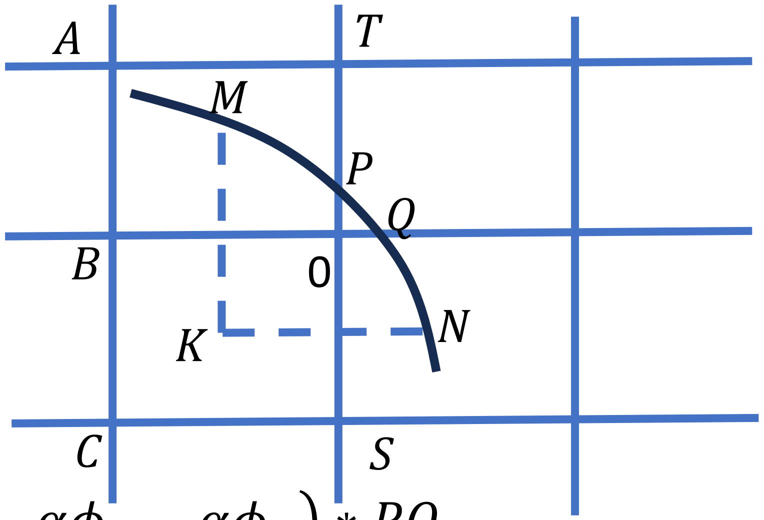
$$\int \nabla^2\phi \, dS = \oint \frac{\partial\phi}{\partial n} \, d\ell$$

- 左边

$$\int \nabla^2\phi \, dS = \int (-V\phi + h)dS = Area_{MKNQPM} * (-V_0\phi_0 + h_0)$$



边界处理：积分法II



- 右边

$$\oint \frac{\partial \phi}{\partial n}\, d\ell = \frac{\phi_B - \phi_O}{h} * MK + \frac{\phi_S - \phi_O}{h} * KN + \int_{MPQN} \frac{\partial \phi}{\partial n} d\ell$$

- 利用边条件

$$\frac{\partial \phi}{\partial n} = g - \alpha\phi$$

- 所以

$$\int_{MPQN} \frac{\partial \phi}{\partial n} d\ell = \int_{MPQN} (g - \alpha\phi)\, d\ell$$
$$= \frac{1}{2}(g_M + g_P - \alpha\phi_M - \alpha\phi_P) * MP + \frac{1}{2}(g_P + g_Q - \alpha\phi_P - \alpha\phi_Q) * PQ$$
$$+(g_Q + g_N - \alpha\phi_Q - \alpha\phi_N) * QN$$

- 若$\alpha = 0$，则令左边=右边，已可建立O的差分格式。

- 若$\alpha \neq 0$，则还需结合之前对第一类边条件的处理来建立额外的方程

作业

1. 教材第四章第一题，采取均匀分割，x和y方向各分20份,用Gauss-Seidel迭代法求解。给出代码，并画出区域里的等高线图。