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

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

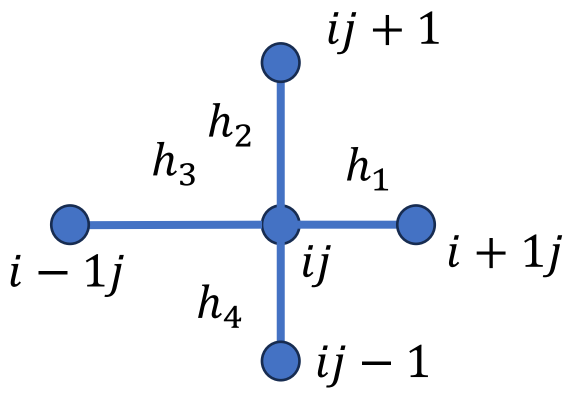
- 二维：均匀分割

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

- 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

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

- 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

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

- 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）： $g_1(s) \neq 0,\ g_2(s) \neq 0$