课程介绍

教师：郭照立

单位：数学与应用学科交叉创新研究院

办公室：欣园2栋113

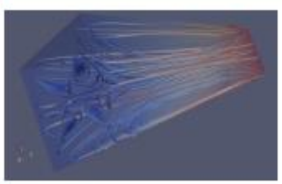
Email：zlguo@hust.edu.cn

课题组网站：http://mnmlab.energy.hust.edu.cn/

研究方向：

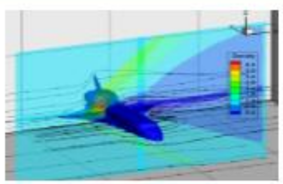
主要研究方向：(1)介观物理模型和跨尺度的数值方法(Lattice Boltzmann方法、Gas-Kinetic Scheme方法、discrete unified gas kinetic scheme方法等); (2)跨尺度气体流动与固体传热、声子输运、稀薄/高超空气动力学；(3)多相多组分渗流微观机理；（4）多孔介质流动数值模拟（如地下水渗流，油藏工程）；（5）以及其他包含溶解沉积等化学反应的流动模拟。

研究方向 MORE >>



隐式动理学格式(implicit kinetic scheme)研究

2019-12-23

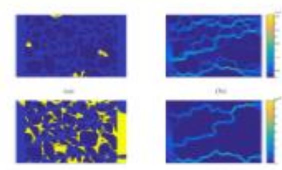


（统一的）气体动理学格式((unified)gas kinetic scheme)

2019-12-23

颗粒两相流数值研究

2019-12-21



多相流数值模拟

2019-12-21

研究生招生 MORE >>

欢迎保研、考研的同学加入MNMLAB，同时也欢迎优秀的高年级本科生加入。郭照立教授常年招聘博士后。课题组为成员提供良好的科研环境和诸多的学术交流机会。

如果有意愿加入MNMLAB，可以直接与郭照立教授(zlguo@hust.edu.cn)、陈松泽副教授(jacksongze

关于本课程

- 基本方法 + 编程实践
- 上机：Matlab （主），C/C++ （次）
- 目的：
  - 基本计算方法的理解、掌握
  - 计算编程

作业及考试

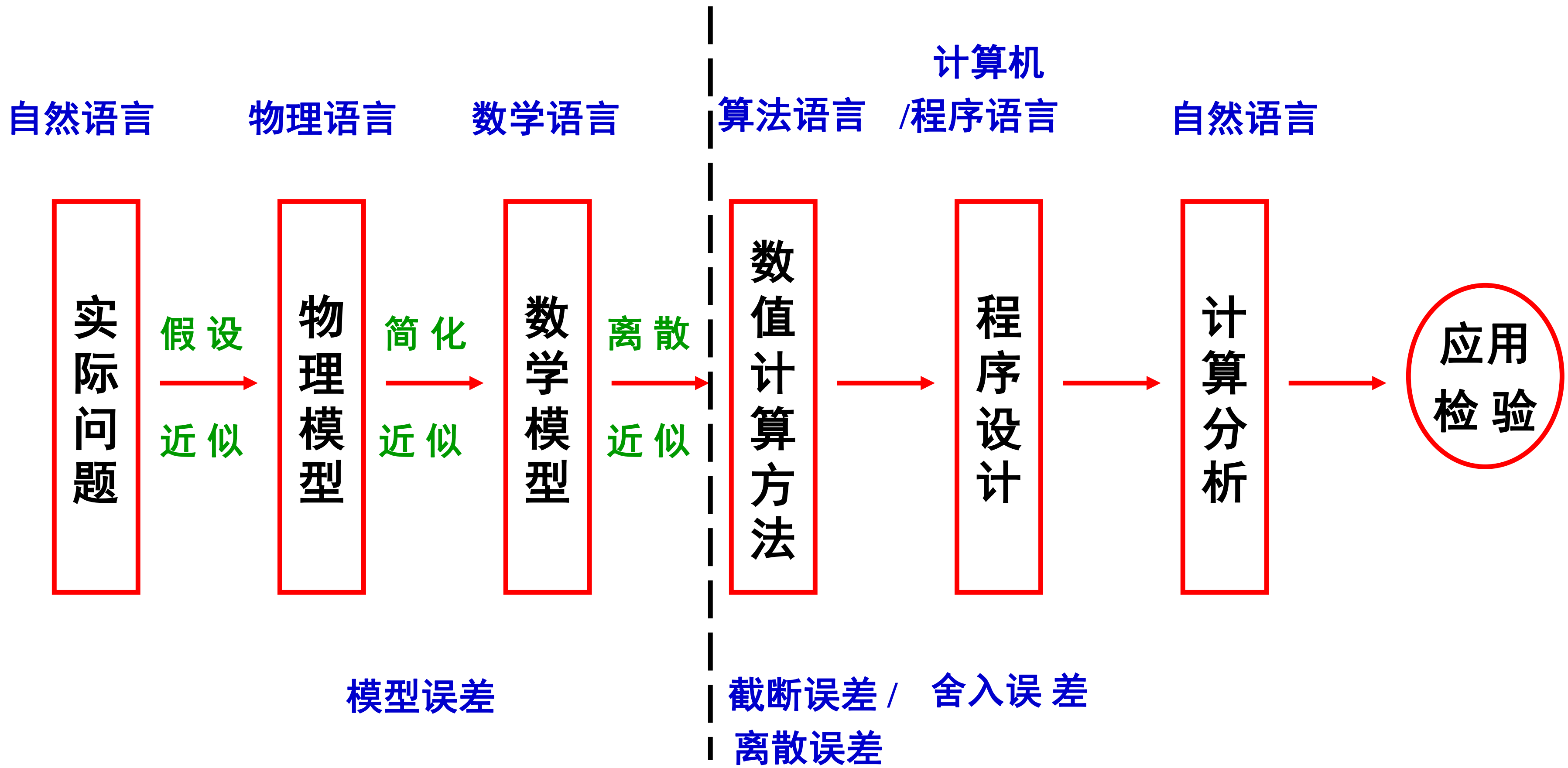
- 作业：
- 每周 1 次，周二上交
- 成绩：考试 80%；作业 20%

课程内容

- 绪论
- 非线性方程的数值解法
- 线性方程组的数值解法
- 插值与曲线拟合方法
- 数值积分/数值微分
- 常微分方程初值问题的数值解法

1. 绪论

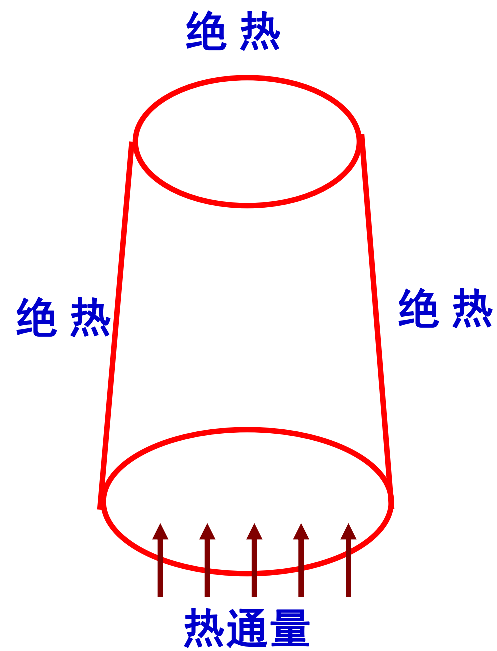
1.1 什么是数值计算方法



例 1

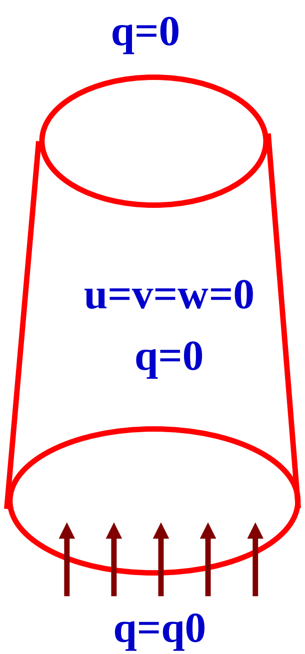
问题：

水壶内的温度分布



物理模型

数学模型



Coordinates: (x,y,z)

Velocity Components: (u,v,w)

Time : t Pressure: p
Density: ρ Stress: τ
Total Energy: Et

Heat Flux: q
Reynolds Number: Re
Prandtl Number: Pr

Continuity:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\frac{\partial(\rho u)}{\partial x}+\frac{\partial(\rho v)}{\partial y}+\frac{\partial(\rho w)}{\partial z}=0$$

X – Momentum:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t}+\frac{\partial(\rho u^2)}{\partial x}+\frac{\partial(\rho uv)}{\partial y}+\frac{\partial(\rho uw)}{\partial z}=-\frac{\partial p}{\partial x}+\frac{1}{Re_r}\left[\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x}+\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y}+\frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z}\right]$$

Y – Momentum:

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t}+\frac{\partial(\rho uv)}{\partial x}+\frac{\partial(\rho v^2)}{\partial y}+\frac{\partial(\rho vw)}{\partial z}=-\frac{\partial p}{\partial y}+\frac{1}{Re_r}\left[\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x}+\frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y}+\frac{\partial \tau_{yz}}{\partial z}\right]$$

Z – Momentum

$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t}+\frac{\partial(\rho uw)}{\partial x}+\frac{\partial(\rho vw)}{\partial y}+\frac{\partial(\rho w^2)}{\partial z}=-\frac{\partial p}{\partial z}+\frac{1}{Re_r}\left[\frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x}+\frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y}+\frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z}\right]$$

Energy:

$$\frac{\partial(E_T)}{\partial t}+\frac{\partial(uE_T)}{\partial x}+\frac{\partial(vE_T)}{\partial y}+\frac{\partial(wE_T)}{\partial z}=-\frac{\partial(up)}{\partial x}-\frac{\partial(vp)}{\partial y}-\frac{\partial(wp)}{\partial z}-\frac{1}{Re_r Pr_r}\left[\frac{\partial q_x}{\partial x}+\frac{\partial q_y}{\partial y}+\frac{\partial q_z}{\partial z}\right]$$

$$+\frac{1}{Re_r}\left[\frac{\partial}{\partial x}(u\tau_{xx}+v\tau_{xy}+w\tau_{xz})+\frac{\partial}{\partial y}(u\tau_{xy}+v\tau_{yy}+w\tau_{yz})+\frac{\partial}{\partial z}(u\tau_{xz}+v\tau_{yz}+w\tau_{zz})\right]$$

数值方法

计算流体力学方法（有限差分、有限体积、有限元 ……）

⇩

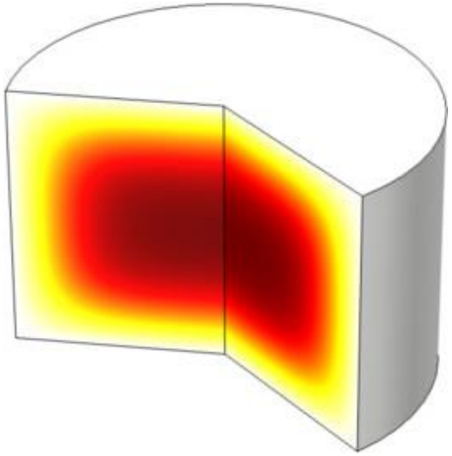
程序设计

算法：SIMPLE、SIMPLIER、 CLEAR ……

软件：FLUENT、STARCD ……

结果分析

(可视化、图、表)



如何评价一个计算方法的优劣？

- 精　　　度：　误差分析
- 时间 / 空间：　复杂度分析
- 计算稳定性：　稳定性分析

一个好的算法往往是简单运算的重复

$$\sqrt{a} \doteq x_{k+1} = \frac{1}{2}\left(\frac{x_k^2 + a}{x_k}\right)$$

例1：用+、-、*、/ 求 $\sqrt{2}$

$$x_{k+1} = \frac{x_k}{2} + \frac{1}{x_k} \doteq \frac{1}{2}\left(\frac{x_k^2 + 2}{x_k}\right)$$

例 2：多项式求值

$$P_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \ldots + a_1 x + a_0$$

***n*次多项式**

$$P_4(x) = a_4 x^4 + a_3 x^3 + a_2 x^2 + a_1 x + a_0 \longrightarrow \text{算法 1}$$

$$= \left(\left(\left(a_4 x + a_3\right) x + a_2\right) x + a_1\right) x + a_0 \longrightarrow \text{算法 2}$$

秦九韶 算法（约公元1202年一1261年，南宋，《数书九章》）

在西方被称作霍纳算法，是以英国数学家霍纳命名的（1819年）

n 次多项式的值 → 求 n 个 1 次多项式的值

秦九韶（1208年－1261年），南宋官员、数学家，与李冶、杨辉、朱世杰并称宋元数学四大家。字道古，汉族，生于普州安岳（今四川安岳），有人称其为山东人。精研星象、音律、算术、诗词、弓剑、营造之学，历任琼州知府、司农丞，后遭贬，卒于梅州任所，1247年完成著作《数书九章》，其中的大衍求一术（一次同余方程组问题的解法，也就是现在所称的中国剩余定理）、三斜求积术和秦九韶算法（高次方程正根的数值求法）是有世界意义的重要贡献，表述的一种求解一元高次多项式方程的数值解的算法-正负开方术，即开高次方和解高次方程，领先英国霍纳（1819年）五百余年。

William George Horner (1786 - 1837).

A British mathematician; he was a schoolmaster, headmaster and schoolkeeper, proficient in classics as well as mathematics, who wrote extensively on functional equations, number theory and approximation theory, but also on optics. His contribution to approximation theory is honoured in the designation Horner's method, in particular respect of a paper in Philosophical Transactions of the Royal Society of London for 1819.

算法 1 $$y = P_4(x) = a_4x^4 + a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0$$

y1=a4*x*x*x*x

y2=a3*x*x*x

y3=a2*x*x

y4=a1*x

y=y1+y2+y3+y4+a0

算法 2 $$P_4(x) = \left(\left(\left(a_4x + a_3\right)x + a_2\right)x + a_1\right)x + a_0$$

y1=a4*x+a3

y2=y1*x+a2

y3=y2*x+a1

y4=y3*x+a0

y=y4

1.2 误差分析

- 误差分类
  - 固有误差
    - 模型误差(物理模型、数学模型的简化、近似处理)
    - 观测误差：原始数据误差（如粘性系数、热传导系数、扩散系数）
  - 计算误差
    - 算法的截断误差
    - 计算过程中的舍入误差（计算机字长： float 7位，double 15位）

例 3 截断误差

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \ldots + \frac{x^n}{n!} + \frac{x^{n+1}}{(n+1)!} + \ldots$$

$$e^x \approx S_n(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \ldots + \frac{x^n}{n!}$$

$$R_n(x) = e^x - S_n(x) = \frac{x^{n+1}}{(n+1)!} + \ldots = \frac{x^{n+1}}{(n+1)!} e^{\theta x}$$

例 4 舍入误差

$$3\pi+\frac{2}{3}=?$$

Float 单精度 （7位）

$$=3*3.1415926535\cdots+0.6666666666\cdots$$

$$\approx 9.424776+0.6666666$$

$$=10.091442$$

double 双精度 （15位）

10.0914446274360

如何评价计算结果的精度？

- 三个常用的概念：
  - 绝对误差
  - 相对误差
  - 有效数字

绝对误差与相对误差

$x \longrightarrow$ 近似值

$x^* \longrightarrow$ 准确值

$e = x^* - x \longrightarrow$ 绝对误差

绝对误差界

$$|e| = |x^* - x| \leq \varepsilon \qquad x = x^* \pm \varepsilon$$

绝对误差(界)是有单位的

$$e_r = \frac{x^* - x}{x^*} = \frac{e}{x^*}$$ → 相对误差

相对误差限

$$|e_r| = \left|\frac{x^* - x}{x^*}\right| \le \varepsilon_r$$

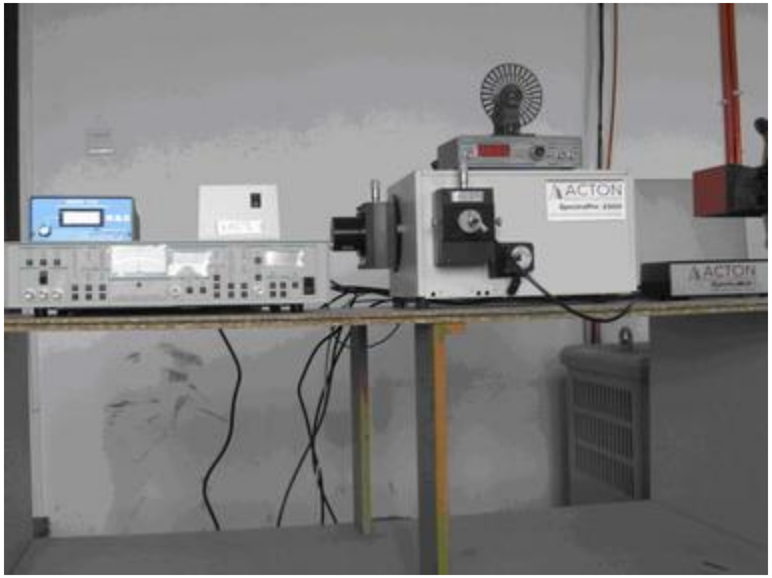
$$|e_r| = \left|\frac{x^* - x}{x}\right| \le \varepsilon_r$$

实际问题：

$$\varepsilon_r = \left|\frac{\varepsilon}{x}\right|$$

相对误差(界)没有单位

光电直读单色仪



仪器型号：SP-2355型
生产厂家：美国AECTON RESEARCH，CO公司
购置日期：2005年
原理及主要性能指标：

光谱测量范围： 200nm～12μm

光栅： 刻划光栅：5块，光栅面积为68mmX68mm，分别为：

（1）75g/mm，闪耀波长：8mm
（2）150g/mm，闪耀波长：4mm
（3）300g/mm，闪耀波长：2mm
（4）1200g/mm，闪耀波长：750nm
（5）1200g/mm，闪耀波长：300nm

光谱分辨率： 0.1nm(1200g/mm光栅, at 435.8nm, 10mm slit)

焦距长度： 300mm

波长精度： ±0.2nm e绝对误差界

通光孔径： f/4

重复性： ±0.05nm

线色散倒数： 2.7nm/mm(1200g/mm光栅)

狭缝宽度： 10mm～3mm连续可调整

驱动步距： 0.0025nm

全自动软件控制波长扫描单色仪，高精度步进电机，高灵敏度紫外-可见-近红外光电接收器；带有RS232和USB接口，配有硬件控制及数据采集、分析软件。

主要用途：用于燃烧火焰辐射光谱的检测。

自动量热仪

仪器型号：6300

生产厂家：美国Parr 公司

购置日期：2004年

原理及主要技术指标：采用封闭体系，假定热量不损失的情况下，放出的热量等于吸收的热量，通过测量体系水的温度变化，得到样品发热量。微处理机控制的自动化量热仪，用来测定固体或液体的热值。采用等温法进行测量。弹筒处于固定倒置位置，不需手工装卸，整个分析过程除装样、接引线以及自动充氧外，输入试样重量后，仪器自动完成所有步骤，得出结果并显示在液晶屏上，完成一个样大概需9分钟。

主要技术指标：准 确 度：偏差<0.15%；

E_r 相对误差界.

样 品 量：0.7---1.5g；

范　　围：ΔT：7000——15000BYU/g；

分 辨 率：1.0BTU/LB,0.001MJ/k。

主要用途：用于测量可燃物的发热量。

- **有效数字：误差大小的一种直观度量（既能表示大小，又能表示精确程度）**

某近似值的绝对误差限是某一位的半个单位，则说该近似值准确到这一位，该位直到最前面第一个非零数字为止的所有数字为有效数字

$a_1 \neq 0.$

$$x = 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m \qquad |x^* - x| < 0.5 \times 10^{m-n}$$

$m=1$

精确到10^{m-n}位，有n个有效数字

四舍五入的数具有相应的有效数字，

$\pi = 0.31415\ldots \times 10^1$

例5 $x = 3.14, \quad 3.1416, \quad 3.14159$

3位 $=1-$

5位 $=1-5$

$$|\pi - x| = |3.1415926535\ldots - 3.14| = 0.00159\ldots < 0.005 = 0.5\times 10^{-2}$$

$$= |3.1415926535\ldots - 3.1416| = 7.34\ldots\times 10^{-6} = 0.734\ldots\times 10^{-5} < 0.5\times 10^{-4}$$

$$= |3.1415926535\ldots - 3.14159| = 2.65\ldots\times 10^{-6} < 0.5\times 10^{-6}$$

$=0.$ $=1-6=$

1.3 误差的传播与数值稳定性

各种误差在计算过程中，会不断传递

	输入	计算	输出
真实值	x	f	$y = f(x)$
近似值	$\tilde{x} = x + \delta x$		$\tilde{y} = f(\tilde{x})$

误差被放大----- 数值不稳定

想让 $f'(x) < 1$

不放大----- 数值稳定

$$\delta y = \tilde{y} - y = f(\tilde{x}) - f(x) \approx f'(x) \cdot (\tilde{x} - x) = \boxed{f'(x)} \cdot \delta x$$

$f(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2$

误差的传播函数

多元函数

$$y = f(x_1, x_2, \cdots x_n)$$

?

$$J = \left[\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \cdots \frac{\partial f}{\partial x_n}\right]$$

$\|J\|_2 \leq 1$ 则不传播.

例子

$$y = x^{365}$$

$$f' = 365 \cdot x^{364}$$

0.99^{365} = 0.025517964452291

1.01^{365} = 37.78343433288728

$f(0.01)$ 变化很大,

蝴蝶效应

- 蝴蝶效应来源于美国气象学家劳仑次60年代初的发现。

- 1961年冬季的一天，劳仑次（E·Lorenz）在皇家麦克比型电脑上进行关於天气预报的计算。为了考察一个很长的序列，他走了一条捷径，没有令电脑从头运行，而是从中途开始。他把上次的输出直接打入作為计算的初值，但由於一时不慎，他无意间省略了小数点后六位的零头，然后他穿过大厅下楼，去喝咖啡。一小时后，他回来时发生了出乎意料的事，他发现天气变化同上一次的模式迅速偏离，在短时间内，相似性完全消失了。进一步的计算表明，输入的细微差异可能很快成为输出的巨大差别。

敏感...

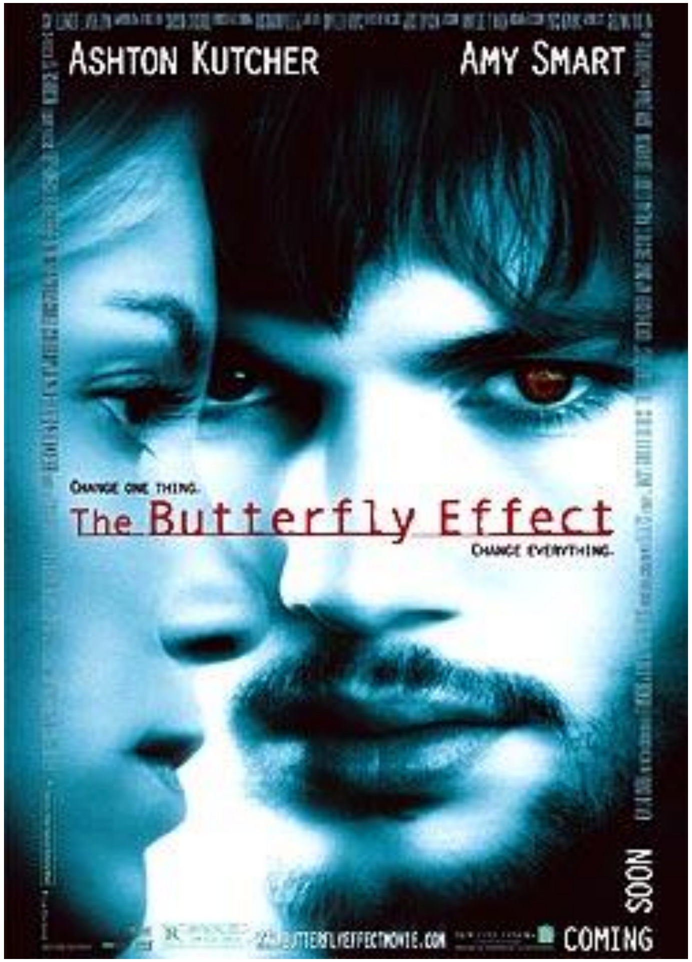
- 这种现象被称为对初始条件的敏感依赖性。在气象预报中，称为蝴蝶效应。劳仑次最初使用的是海鸥效应。

- 劳仑次1979年12月29日在华盛顿的美国科学促进会的演讲：一只蝴蝶在巴西扇动翅膀会在德克萨斯引起龙卷风吗?

长期天气预报不可能；地震预报不可能

好莱坞系列电影


THE BUTTERFLY EFFECT 2
CAN YOU CHANGE
YOUR PAST WITHOUT
DESTROYING YOUR FUTURE?


ASHTON KUTCHER
AMY SMART
CHANGE ONE THING.
The Butterfly Effect
CHANGE EVERYTHING.
COMING SOON

例 5

$$I_n = e^{-1}\int_0^1 x^n e^x dx \qquad n = 0, 1, \ldots, 7$$

$$I_n = 1 - nI_{n-1},\quad n = 1, \ldots, 7$$

$\tilde{I}_7 = 1 - 6\tilde{I}_6$

$I_7 = 1 - 6I_6$

$\delta I_7 = 6\delta I_6$

$\tilde{I}_6 = \dfrac{1-\tilde{I}_7}{7}$

$I_6 = \frac{1}{7}(1 - I_7)$

$\delta I_6 = \frac{1}{7}\delta I_7$

误差放大

算法1.

$$I_0 = 1 - e^{-1} \approx 0.6321$$

$$I_n = 1 - nI_{n-1}$$

$I_7 = e^{-1}\int_0^1 x^7 e^x dx$

$\approx e^{-1}e^{\xi}\int_0^1 x^7 dx$

$\approx \frac{1}{8}x^8\Big|_0^1 e^{-1}e^{\xi}$

$\approx e^{-1}\dfrac{e^1+e^0}{2}\cdot\dfrac{1}{8}$

算法2.

$$I_7 \approx \frac{1}{2}\left(\frac{e^{-1}}{8} + \frac{1}{8}\right) \approx 0.1124$$

$$I_{n-1} = (1 - I_n)/n,\quad n = 7, 6, \ldots, 1$$

误差缩小 $\delta I_{n-1} = \frac{1}{n}(-\delta I_n)$

输出值

误差控制

$$\delta y = \tilde{y} - y = f(\tilde{x}) - f(x) \approx f'(x) \cdot (\tilde{x} - x) = \boxed{f'(x)} \cdot \delta x$$

可以把误差近似看成微分：

避免

$$\delta y \approx dy, \quad \delta x = dx$$

- 避免大数除小数 $\frac{x}{y},\ (|\,y\,| \ll 1)$
- 两个相近数相减 $x - y,\ (x \approx y)$
- 大数吃小数 $x \pm y,\ (|\,x\,| \gg |\,y\,|)$
- 减少运算次数

避免大数除小数

$$\left| d\left(\frac{x}{y}\right) \right| = \left| \frac{ydx - xdy}{y^2} \right| \gg 1$$

两个相近数相减

$$x = 0.a_1 a_2 \cdots a_{n-1} a_n \times 10^m, \quad y = 0.a_1 a_2 \cdots a_{n-1} b_n \times 10^m$$

$$x - y = 0.c \times 10^{m-n+1}$$

有效数字损失！

258.12-258.11=0.01

大数吃小数

$$x = 1.234567 \times 10^8, \quad y = 0.01 = 0.000000 \times 10^8$$

计算机计算时，先对阶

避免大数除小数

$$\left| d\left(\frac{x}{y}\right) \right| = \left| \frac{ydx - xdy}{y^2} \right| \gg 1$$

两个相近数相减

$$x = 0.a_1 a_2 \cdots a_{n-1} a_n \times 10^m, \quad y = 0.a_1 a_2 \cdots a_{n-1} b_n \times 10^m$$

$$x - y = 0.c \times 10^{m-n+1}$$

有效数字损失！

258.12-258.11=0.01

大数吃小数

$$x = 1.234567 \times 10^8, \quad y = 0.01 = 0.000000 \times 10^8$$

计算机计算时，先对阶

避免大数除小数

$$\left| d\left(\frac{x}{y}\right) \right| = \left| \frac{ydx - xdy}{y^2} \right| \gg 1$$

两个相近数相减

$$x = 0.a_1a_2\cdots a_{n-1}a_n \times 10^m, \quad y = 0.a_1a_2\cdots a_{n-1}b_n \times 10^m$$

$$x - y = 0.c \times 10^{m-n+1}$$

有效数字损失！

258.12-258.11=0.01

1 先将小数累积

2 将单精度改为双精度

大数吃小数

$$x = 1.234567 \times 10^8, \quad y = 0.01 = 0.000000 \times 10^8$$

计算机计算时，先对阶

避免大数除小数 $|d\left(\frac{x}{y}\right)|=|\frac{ydx-xdy}{y^2}|\gg 1$

两个相近数相减

$$x=0.a_1a_2\cdots a_{n-1}a_n\times 10^m,\quad y=0.a_1a_2\cdots a_{n-1}b_n\times 10^m$$

$$x-y=0.c\times 10^{m-n+1}$$

有效数字损失!

258.12-258.11=0.01

大数吃小数

x=1.234567×10^8, $\quad y=0.01=0.000000\times 10^8$ 计算机计算时，先对阶