

计算流体力学讲义

(基础篇)

任玉新
清华大学工程力学系
流体力学研究所

2003 年 7 月

第一章 绪论

§1 计算流体力学：概念与意义

一、什么是计算流体力学

任何流体运动的规律都是由以下 3 个基本定律为基础的：1) 质量守恒定律；2) 牛顿第二定律（力 = 质量 \times 加速度），或者与之等价的动量定理；3) 能量守恒定律。这些基本定律可由积分或者微分形式的数学方程（组）来描述。把这些方程中的积分或者（偏）微分用离散的代数形式代替，使得积分或微分形式的方程变为代数方程（组）；然后，通过电子计算机求解这些代数方程，从而得到流场在离散的时间/空间点上的数值解。这样的学科称为计算流体（动）力学（Computational Fluid Dynamics，以下简称 CFD）。CFD 有时也称流场的数值模拟，数值计算，或数值仿真。

在流体力学基本方程中的微分和积分项中包括时间/空间变量以及物理变量。要把这些积分或者微分项用离散的代数形式代替，必须把时空变量和物理变量离散化。空间变量的离散对应着把求解域划分为一系列的格子，称为单元体或控制体（mesh, cell, control volume）。格子边界对应的曲线称为网格（grid），网格的交叉点称为网格点（grid point）。对于微分型方程，离散的物理变量经常定义在网格点上。某一个网格点上的微分运算可以近似表示为这个网格点和相邻的几个网格点上物理量和网格点坐标的代数关系（这时的数值方法称为有限差分方法）。对于积分型方程，离散物理量可以定义在单元体的中心、边或者顶点上。单元体上的积分运算通常表示为单元体的几何参数、物理变量以及相邻单元体中物理变量的代数关系（这时的数值方法称为有限体积方法和有限元方法）。所谓数值解就是在这些离散点或控制体中流动物理变量的某种分布，他们对应着的流体力学方程的用数值表示的近似解。由此可见，CFD 得到的不是传统意义上的解析解，而是大量的离散数据。这些数据对应着流体力学基本方程的近似的数值解。对于给定的问题，CFD 研究的目的在于通过对这些数据的分析，得到问题的定量描述。在这一点上，CFD 与实验研究有类似之处。另一方面，CFD 直接处理的是描述流动的数学模型：微分或积分形式的方程组及其边界条件。在这一点上，CFD 与理论流体力学又是相同的。

CFD 可以应用于所有与流体运动相关的领域。无论在那个领域中，为了获得问题满意的答案，CFD 的研究通常应该遵循下面的步骤：

第一，问题的界定和流动区域的几何描述。应明确要解决的问题中流场的几何形状，流动条件和对于数值模拟的要求。几何形状通常来源于对于已知流动区域的测量。如果处于设计阶段，流场的几何形状可能不是完全确定的，在这种情况下，必须知道对于流场的几何形状有哪些限制条件，并根据这些限制条件或其他初步设计手段确定流场的假定形状，然后根据模拟的结果对几何形状进行不断调整，在多次模拟的过程中，逐步确定最终几何形状。流动条件可以包括流动的

雷诺数、马赫数、边界处的速度、压力等等。对于数值模拟的要求包括：数值模拟的精度和所花费的时间，所感兴趣的流动参数等。

第二，选择主控方程和边界条件。主控方程指在数值计算过程中要求解的方程。在问题确定后，必须选择流动的主控方程和边界条件。一般认为，在牛顿流体范围内，所有的重要流动现象都可以用 Navier - Stokes 方程来描述。但是，为了提高计算的效率，有时可以选择经过简化的数学模型（如果这种简化仍能保留流动的物理本质，满足对于数值模拟的要求的话）。简化模型包括势流方程，Euler 方程，边界层方程，薄层近似的 N - S 方程等等。根据问题的特点，可以考虑定常或非定常、可压或不可压的流动模型。边界条件可以有固体壁面条件，来流、出流条件，周期条件，对称条件等。边界条件通常依赖于主控方程，如在固体壁面，Euler 方程要求采用不可渗透条件，而 N - S 方程要求无滑移条件。如果有必要，我们还需要采用一些附加的物理模型，最典型的例子就是湍流模型。虽然 N - S 方程可以描述湍流流动，但是直接采用原始的 N - S 方程计算湍流流动（称为直接数值模拟）要求网格点的数量非常多，因而计算量非常大，这是目前的计算机所不能承受的。所以人们通常采用经过 Reynolds 平均的 N - S 方程，为了封闭这个方程就必须采用某种湍流模式。

第三，确定网格划分策略和数值方法。在 CFD 中，网格划分可以有各种不同的策略，如结构网格、非结构网格、组合网格、重叠网格等。网格可以是静止的，也可以是运动的（动网格），还可能根据数值解动态调整（自适应网格）。CFD 中的数值方法有有限差分、有限体积、有限元、谱方法等。数值方法和网格划分策略是相互关联的。例如，如果采用有限差分方法，通常要选用结构化网格；而有限体积方法和有限元方法则可以适应于结构和非结构网格。根据网格划分策略和数值方法，最终应该形成数值求解基本方程和边界条件的计算机程序或软件。这些程序，可以是针对某一问题自行编制的，也可以应用已有的程序和商业软件。

第四，数值解的评价和解释。通过在计算机上调试、运行上述软件，可以得到数值解。对数值解进行分析是 CFD 中非常重要的环节，也称为后处理（Post - processing）。后处理包括计算感兴趣的力、力矩；包括应用流场可视化的软件对于流场进行显示、分析；包括对于数值方法和物理模型的误差进行评估等等。

二、 计算流体力学的特点及其与理论和实验流体力学的关系

自从 1687 年牛顿发现宏观物体运动的基本定律以来，直到 20 世纪 50 年代初，研究流体运动规律的主要方法有两种：实验研究和理论研究。流体力学从其发展历史来看，最早是一门实验科学。在 17 世纪，法国和英国的科学家奠定了实验流体力学的基础。在 18 和 19 世纪，理论流体力学得到了持续的发展，Euler、Lagrange、Navier、Stokes 等人建立了描述流体运动的基本方程。在 20 世纪，由于军事和民用航空工业的需要，人们建造了以风洞、水洞为代表的多种实验装置，用来显示飞行器运动时的流场和测量飞行器受到的空气作用力。在这个过程中，实验流体力学得到了迅速发展。实验研究也促进了理论流体力学的发展，代表性的工作有 Prantl 的边界层理论和 Von Karman 在空气动力学方面的成果。随着流

体力学研究的进展,实验和理论研究的优势和困难也逐渐为人们所认识。实验研究的优点是可以借助各种先进仪器设备,给出多种复杂流动的准确、可靠的观测结果。这些结果对于流动机理的研究和与流体运动有关的机械和飞行器的设计具有不可替代的作用。但是,实验研究通常费用高昂,周期很长;而且有些流动条件难以通过实验模拟(如航天飞行器周围的高速、高温流动)。理论研究的优点是可以给出具有一定适用范围的简洁明了的解析解或近似解析解。这些解析解对于分析流动的机理和预测流动随参数的变化非常有用。其缺点是一般只能研究简单流动模型。由于流体的运动具有强非线性,所研究问题的数学模型必须经过很大的简化,在这种条件下得到的解析解的适用范围非常有限,而且能够得到解析解的问题也为数不多,远远不能满足工程设计的需要。

随着高速电子计算机的出现,研究流体运动规律的“第三种方法”- 计算流体力学应运而生。CFD 产生于第二次世界大战前后,在 20 世纪 60 年代左右逐渐形成了一门独立的学科。由于 CFD 作为一门独立学科的历史还比较短,所以,我们不打算对 CFD 的发展历史作具体的描述。但是很显然,CFD 发展的主要动因是利用高速电子计算机这一新的工具,克服理论研究和实验研究的缺点,深化对于流体运动规律的认识并提高解决工程实际问题的能力。CFD 得到的是某一特定流体运动区域内,在特定边界条件和参数的特定取值下的离散的数值解。因而,我们无法预知参数变化对于流动的影响和流场的精确的分布情况。因此,它提供的信息不如解析解详尽、完整。在这一点,它于实验测量相近,所以,用 CFD 研究流动的过程也称“数值实验”。但是,与理论流体力学相比,CFD 的突出优点是它本质上可以研究流体在任何条件下的运动。在 CFD 中采用简化数学模型的目的在于提高计算效率以及和计算机硬件水平相适应;如果计算机条件允许,我们在求解任意复杂的流动问题时,都可以采用最适合流动物理本质的数学模型。因此,CFD 使得我们研究流体运动的范围和能力都有了本质的扩大和提高。在模拟极端条件下的流体运动的方面,和实验测量相比,CFD 也显示了明显的优势。同实验研究相比,CFD 还具有费用少,周期短的优点。今天,CFD 已经取得了和实验流体力学及理论流体力学同等重要的地位,流体力学的研究呈现出“三足鼎立”之势。

CFD 作为一个比较新的学科,还有其它一些鲜明的特点:

首先,CFD 的发展及应用与计算机技术的发展直接相关。CFD 发展的一个基本条件是高速、大容量的电子计算机。随着对 CFD 的了解的不断深入,我们将对这一点有越来越清楚的认识。今天,计算机技术的迅速发展,已经使得采用 CFD 方法研究一些工程实际问题成为可能。例如,通过求解三维 Reynolds 平均的 Navier - Stokes 方程进行对与流体运动有关的过程和装置的分析与设计正在成为航空航天和其他工业领域的新的研究手段。最近 10 年以来,计算流体运动的商业 CFD 软件不断涌现,极大的促进了 CFD 在工业领域的应用。但是,还有很多问题,如高雷诺数条件下湍流的直接数值模拟,由于对于计算机速度和容量的要求极高,目前和近期还无法用 CFD 方法解决。所以,计算机技术的发展,已经为 CFD 的广泛应用提供了一定可能,而 CFD (和其他基于大规模数值计算的学科)的发展还不断对计算机技术的进一步提高提出新的要求。

第二,CFD 与应用数学有密切的联系。CFD 中,要把流体力学基本方程中积分和微分的运算化为离散的代数运算,这样,就产生了一系列的数学问题。1) 离散的代数方程逼近原来的积分或微分方程的程度如何?数值解逼近微分或积分方程精确解(如果存在的话)的程度如何?这些就是所谓 CFD 方法的精度和

误差估计问题。2) 当离散点的数量趋近于无穷大, 间距趋近于无穷小时, 数值解是否趋近于精确解? 这就是所谓数值方法的收敛性问题。3) 在计算机上, 数值计算是以有限的字长(有效数字)进行的, 例如计算机不能无限精确的表示一个无理数, 因此, 计算机得到的数值解是“近似的”数值解。由于机器字长有限产生的误差称为“舍入误差”。舍入误差对于数值计算结果的影响如何, 是不是会无穷增长以至于得不到有意义的数值解? 这就是数值方法的稳定性问题。4) 在可压缩流动中, 会出现激波等间断现象。为了正确描述这一现象, 必须对微分方程解的定义进行扩充, 扩充后的解称为广义解或弱解。那么, 广义解和物理上的真实解是什么关系, 要保证广义解是有物理意义的真实解必须满足什么条件? 这些问题以及未列出的其他众多相关问题, 都是应用数学研究的重要内容, 也是 CFD 研究的中心内容。一方面, 这些问题的研究已经取得了很大进展, 并促进了 CFD 的迅速发展。另一方面, 流体运动的基本方程是非线性的, 数值方法也必须体现非线性的特点; 而涉及非线性的许多问题目前还没有很好的解决。比如非线性问题的稳定性、收敛性和误差估计, 一般意义下广义解的唯一性条件还是 CFD 和应用数学研究的难点问题。由于 CFD 在理论上还不甚成熟, CFD 方法的发展很大程度上依靠研究者的经验和直觉。所以有人认为, CFD 与其说是一门科学, 还不如说是一门艺术。同时, 由于一些涉及非线性的关键理论问题还没有解决, 人们对于 CFD 计算结果的可靠性还有所怀疑, 这也妨碍了 CFD 的广泛应用。

第三, CFD 的发展在很大程度上依赖于实验和理论流体力学的发展。由于缺乏对于数值解误差进行估计的严格理论, CFD 计算结果的验证通常依赖于和实验结果的对比。CFD 研究原则上可以采用各种数学模型, 而这些数学模型则是理论流体力学研究的直接成果。比如, 湍流流动的数值计算, 在大多数情况下要引入所谓“湍流模式”, 而这些模式, 无论是基于 Reynolds 平均方程的湍流模式还是最近得到迅速发展的“大涡模拟”中的亚网格尺度模式, 都是理论流体力学研究中非常活跃的课题。对湍流流动的准确预测, 与这些模式的有效性密切相关。因此, CFD 的发展不可能取代理论或实验流体力学, 他们之间是一种相互补充, 相互促进的关系。

第四, CFD 研究呈现出明显的学科交叉性。CFD 的生命力在于广泛应用于多个工业领域, 解决其中涉及的与流体运动相关的问题。为了解决这些问题, CFD 研究必须和这些领域的研究密切交叉和融合。

三、 CFD 的意义

CFD 作为一个独立的学科, 经过数十年的迅速发展, 已经称为流体力学科学研究和工程分析设计的重要手段。

1. CFD - 流体力学研究的工具

理论流体力学提供了描述流体运动的丰富的数学、物理模型; 而实验流体力学发现了流体运动中许多奇妙和有重要意义的现象。CFD 则架起了从数理模型到流动现象之间的桥梁, 成为流体力学研究的重要手段。前面提到, CFD 与实验研究有类似之处, 流场的数值模拟也常常称为“数值实验”, 而且 CFD 可以提

供比实验研究更为丰富的流动细节。另一方面，CFD 求解的是描述流动的微分或积分形式的方程组及其边界条件，而流动的方程和边界条件又是理论流体力学研究的重要内容。利用 CFD 的这些特点，有可能建立理论流体力学和实验流体力学之间的“数值关联”。具体的说，如果 CFD 可以再现某种实验现象，我们就可以确定这种现象的数学模型，物理机制，产生、演化的条件和方式。从而加深对于这种流动现象机理的认识。

不仅如此，由于 CFD 对于流动的预测能力，使得 CFD 也可以发现一些新的流动现象和机理。例如，例如 Campbell 和 Mueller 等人在数值实验中，发现了亚声速斜坡绕流中的分离现象，以后他们在风洞实验中做了证实；又如 Kim 和 Moin 等人在数值计算中发现了倒马蹄涡，后来的实验研究验证了他们的发现。综上所述，CFD 已经成为流体力学研究的重要工具。事实上，今天无论是从事理论研究还是实验研究，数值模拟这一工具都是不可或缺的。

2. CFD - 工程设计和分析的工具

CFD 的最早的成功应用是在航空航天领域。在 20 世纪六、七十年代，CFD 成功的解决了对于航天飞机和洲际弹道导弹等再入飞行器的设计具有重要意义的超音速和高超音速钝体绕流问题。在七、八十年代，研制了基于全位势方程和 Euler/边界层方程的整架飞机流场数值模拟程序，这些程序已经在新型飞机的研制中发挥了重要作用。目前，基于求解 Reynolds 平均的 Navier-Stokes 方程的整机流场数值模拟程序也已经出现，经过在湍流模式和计算效率方面的进一步改进后，有可能成为新一代的飞机气动设计方法。CFD 在飞机设计中当前要解决的问题主要包括：增升装置性能预测，巡航空气动力学，层流控制，湍流减阻，气动弹性分析，发动机安装对飞机性能影响等。利用 CFD 技术进行飞机的多学科多目标优化设计已经成为研究的热点问题。人们希望，在今后 5-10 年内，通过广泛应用 CFD 技术，使飞机的设计周期缩短 40-50%，升阻比提高 15-20%，风洞试验减少 50%。世界上所有重要的飞机制造商都在投入大量资金发展自己的 CFD 技术，以保持竞争力。

除此之外，CFD 还在汽车，能源动力，化工，船舶，工业加工等许多领域得到了广泛应用，已经成为工业设计的重要手段。

四、本讲义的主要内容

作为计算流体力学的入门，本讲义主要介绍 CFD 中的数值方法及其应用，其中数值方法仅限于有限差分(Finite Difference)方法和有限体积(Finite Volume)方法。我们将对数值方法的构造、性质和应用进行详细的介绍。本讲义也将简单讨论边界条件的处理和网格生成等问题。

§2 流体力学基本方程

一 流体力学基本方程

流体的运动满足质量守恒、动量守恒和能量守恒的规律。在牛顿流体范围内，这些规律可以用 Navier - Stokes 方程描述（在 CFD 中常把连续方程、动量方程和能量方程通称 Navier - Stokes 方程）：

1). 连续方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho dV + \oint_S \rho \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} dS = 0 \text{ (积分型)} \quad (1a)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0 \text{。 (微分型)} \quad (1b)$$

2). 动量方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho \mathbf{V} dV + \oint_S \rho \mathbf{V} \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} dS = \iiint_V \rho \mathbf{F} dV + \oint_S \vec{\tau} \cdot \mathbf{n} dS \text{ (积分型)} \quad (2a)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{V})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} \mathbf{V}) = \rho \mathbf{F} + \nabla \cdot \vec{\tau} \text{, (微分型)} \quad (2b)$$

其中, $\vec{\tau} = -p \vec{\mathbf{I}} + \vec{\tau}^*$, $\vec{\tau}^*$ 为粘性应力张量。

则动量方程也可以写为：

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho \mathbf{V} dV + \oint_S (\rho \mathbf{V} \mathbf{V} + p \vec{\mathbf{I}}) \cdot \mathbf{n} dS = \iiint_V \rho \mathbf{F} dV + \oint_S \vec{\tau}^* \cdot \mathbf{n} dS \quad (2c)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{V})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} \mathbf{V} + p \vec{\mathbf{I}}) = \rho \mathbf{F} + \nabla \cdot \vec{\tau}^* \text{。} \quad (2d)$$

3). 能量方程：

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho E dV + \oint_S \rho E \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} dS = \iiint_V \rho \mathbf{F} \cdot \mathbf{V} dV + \oint_S (\vec{\tau} \cdot \mathbf{V} - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{n} dS \text{ (积分型)} \quad (3a)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{V}) = \rho \mathbf{F} \cdot \mathbf{V} - \nabla \cdot \mathbf{q} + \nabla \cdot (\vec{\tau} \cdot \mathbf{V}) \text{, (微分型)} \quad (3b)$$

其中,

$$\rho E = \rho e + \frac{\rho}{2} V^2 \quad (e : \text{内能}, E : \text{总能})$$

$$\begin{aligned}\nabla \cdot (\vec{\tau} \cdot \mathbf{V}) &= -\nabla \cdot (p\mathbf{V}) + \nabla \cdot (\vec{\tau}^* \cdot \mathbf{V}) \\ -\nabla \cdot \mathbf{q} &= \nabla \cdot (k\nabla T) \circ\end{aligned}$$

能量方程也可以写为：

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho E dV + \oiint_S (\rho E + p) \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} dS = \iiint_V \rho \mathbf{F} \cdot \mathbf{V} dV + \oiint_S (\vec{\tau}^* \cdot \mathbf{V} + k\nabla T) \cdot \mathbf{n} dS \quad (3c)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot [(\rho E + p)\mathbf{V}] = \rho \mathbf{F} \cdot \mathbf{V} + \nabla \cdot (k\nabla T) + \nabla \cdot (\vec{\tau}^* \cdot \mathbf{V}) \circ \quad (3d)$$

为了使上述方程封闭，还应补充流体的状态方程。对于完全气体，有

$$\begin{aligned}p &= \rho RT \\ \rho e &= \frac{p}{\gamma - 1} \circ\end{aligned}$$

上述方程的详细推导，请参看有关流体力学书籍。

上面我们给出了积分型方程和对应的微分型方程。微分型方程可由积分型方程在考虑到控制体的形状的任意性后导出。积分型的方程可以由多种形式，上面给出的形式是在控制体在空间固定的特殊情况下得到的，是 Euler 型积分方程。Euler 型积分方程直观地反映了质量、动量的守恒关系，也称为守恒型积分方程。对守恒型积分方程直接应用 Gauss 定理，并考虑到控制体形状的任意性后得到的微分型方程称为守恒型微分方程。显然，上面给出的微分型方程也是守恒型方程。守恒型微分方程的特点是：所有空间导数项均为散度的形式。

上面说到，积分型的方程可以由多种形式。如果控制体随流体质点一起运动，我们可以得到下面的（Lagrange 型）连续方程

$$\frac{D}{Dt} \iiint_V \rho dV = 0$$

这种形式的方程称为非守恒型方程。对于微分型方程，凡是空间导数不为散度形式，就称为非守恒型方程，如连续方程可以写为下面的非守恒形式：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \rho + \rho \nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \circ$$

积分型方程和微分型方程在意义上有微妙的差别：积分型方程允许在（空间固定的）控制体内部流动参数有间断；而微分型方程假定流动参数是可微的，因而是连续的。当从积分型方程推导微分型方程时，这一点可以看得很清楚：在推导过程中我们要利用 Gauss 公式，而使用 Gauss 公式的条件是变量是连续的。综上所述，积分型方程可以看作比微分型方程更具有基础意义，尤其是流场中确实存在间断（如激波）时。

二、CFD 中流体力学方程常用的计算形式：直角坐标系下的守恒型方程

1. Navier - Stokes 方程和 Euler 方程

不计质量力的情况下，在直角坐标系中，守恒型 N - S 方程为：

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial (\mathbf{F} - \mathbf{F}_1)}{\partial x} + \frac{\partial (\mathbf{G} - \mathbf{G}_1)}{\partial y} + \frac{\partial (\mathbf{H} - \mathbf{H}_1)}{\partial z} = 0, \quad (4)$$

其中

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho E \end{pmatrix} \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (\rho E + p)u \end{pmatrix} \quad \mathbf{G} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho vu \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ (\rho E + p)v \end{pmatrix} \quad \mathbf{H} = \begin{pmatrix} \rho w \\ \rho uw \\ \rho vw \\ \rho w^2 + p \\ (\rho E + p)w \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{F}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{xz} \\ u\tau_{xx} + v\tau_{xy} + w\tau_{xz} + k \frac{\partial T}{\partial x} \end{pmatrix} \quad \mathbf{G}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yy} \\ \tau_{yz} \\ u\tau_{xy} + v\tau_{yy} + w\tau_{yz} + k \frac{\partial T}{\partial y} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{H}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{xz} \\ \tau_{zy} \\ \tau_{zz} \\ u\tau_{xz} + v\tau_{zy} + w\tau_{zz} + k \frac{\partial T}{\partial z} \end{pmatrix}.$$

如果忽略 N - S 方程中的粘性和热传导，得到的简化方程为 Euler 方程：

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial z} = 0. \quad (5)$$

方程 (4)、(5) 称为矢量守恒型方程。其重要特点是：连续、动量和能量方程被写为统一形式。其中， $\mathbf{U}, \mathbf{F}, \mathbf{G}, \mathbf{H}, \mathbf{F}_1, \mathbf{G}_1, \mathbf{H}_1$ 均为列向量， \mathbf{U} 是方程的解向量，称为守恒变量； $\mathbf{F}, \mathbf{G}, \mathbf{H}, \mathbf{F}_1, \mathbf{G}_1, \mathbf{H}_1$ 称为通量 (flux)，具体说 $\mathbf{F}, \mathbf{G}, \mathbf{H}$ 为无粘通量， $\mathbf{F}_1, \mathbf{G}_1, \mathbf{H}_1$ 为粘性通量。

前面说过，守恒型方程的空间导数项为散度的形式。(4)，(5)式所示的矢量型守恒方程，实际上仍然是散度形式。显然，(4)，(5)式的另一种等价形式为：

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{\mathbf{E}} = 0, \quad (6)$$

其中

$$\vec{\mathbf{E}} = (\mathbf{F} - \mathbf{F}_1)\mathbf{i} + (\mathbf{G} - \mathbf{G}_1)\mathbf{j} + (\mathbf{H} - \mathbf{H}_1)\mathbf{k}, \text{ 或}$$

$$\vec{\mathbf{E}} = \mathbf{F}\mathbf{i} + \mathbf{G}\mathbf{j} + \mathbf{H}\mathbf{k}.$$

把(6)式在任意固定的控制体上积分，并利用 Gauss 公式，有

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \mathbf{U} dV + \oint_S \vec{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{n} dS = 0. \quad (7)$$

这就是守恒积分型方程。可见，守恒的微分、积分型方程之间有直接的联系。(7)式是我们以后将要讲到的有限体积方法的出发方程，而(4)，(5)或(6)则是有限差分方法的出发方程。

2. 讨论

上面，我们特别强调了守恒型的流体力学基本方程。事实上，流体力学基本方程可以写成多种形式，包括守恒型和非守恒型。从理论流体力学的角度，各种形式的方程都是等价的。只是由于最近 20 余年来，CFD 的迅速发展和普及，使得守恒型和非守恒型方程的区分变得有实质的意义。目前，在 CFD 中，各种形式的基本方程都在使用，但无疑，守恒型方程是使用最频繁的一种形式。我们可以从两个方面解释这一现象：

第一，守恒型的连续、动量和能量方程可以写成如(4)、(5)式的统一形式，这为研究数值方法和编程提供了方便。

第二，也是更为本质的原因是：虽然从理论上，守恒型方程和非守恒型方程是等价的，但是，基于守恒型方程和非守恒型方程的数值方法一般是不等价的！这种不等价性的结果就是：基于守恒型方程的数值方法可以直接用来计算有间断（如激波）的流场，而不用对间断进行任何特殊处理，这种基于守恒型方程的数值方法称为激波捕捉（shock - capturing）方法。而基于非守恒型方程的数值方法一般不能正确的计算有激波间断的流场。为了处理有间断的流动，基于非守恒型方程的数值方法必须与一种称为激波装配（shock - fitting）的方法联合使用。所谓激波装配，就是把激波从流场中分离出来，当作边界来处理。激波装配方法的优点是可以准确的计算激波的位置，但缺点是非常复杂。相反，激波捕捉方法则非常简单，但是计算出的激波不是理想的间断，而是有几个网格的厚度的大梯度结构。随着现代高精度、高分辨率数值方法的发展，激波捕捉方法的质量不断提高，已经占有主导地位。

三、边界条件

流体力学问题一般是所谓“初边值问题”。只有在适当的边界条件下，问题才是适定的。

对于粘性流动的适定边界条件是：在固体壁面上速度满足无滑移条件，

$$\mathbf{V}_w = 0。$$

温度条件可以是下面三种之一：

等温条件： T_w 已知，

$$\text{热流条件：} \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_w = -\frac{\dot{q}_w}{k}，$$

$$\text{绝热条件：} \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_w = 0。$$

对于无粘流动，壁面满足不可穿透条件，

$$\mathbf{V}_w \cdot \mathbf{n} = 0。$$

—

除了物理边界条件，在计算流体力学中，边界条件的数值实施也是一个非常重要的问题。

§3 偏微分方程的分类及数学性质

一、一阶拟线性方程组

我们知道 Euler 是一阶非线性偏微分方程，Navier - Stokes 方程是二阶非线性偏微分方程。下面将要说明，流体力学的基本方程都可以写为一阶拟线性方程组的形式。以两个自变量的偏微分方程为例，其一阶拟线性形式为：

$$B \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + A \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = \mathbf{C} \quad (1)$$

其中 \mathbf{U}, \mathbf{C} 是 m 维列向量， B, A 均为 $m \times m$ 方阵。(1) 式对一阶导数项而言是线性的，而如果 B, A 是 \mathbf{U} 的函数，整个方程组则为非线性的，因此，我们称 (1) 式为拟线性方程组。

流体力学基本方程都可以写成一阶拟线性形式。以一维 Euler 方程

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = 0 \quad (2)$$

为例。U,F 分别为

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho E \end{pmatrix} \triangleq \begin{pmatrix} \rho \\ m \\ \varepsilon \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ (\rho E + p)u \end{pmatrix} \triangleq \begin{pmatrix} m \\ \frac{m^2}{\rho} + (\gamma - 1)(\varepsilon - \frac{m^2}{2\rho}) \\ \frac{m}{\rho}[\varepsilon + (\gamma - 1)(\varepsilon - \frac{m^2}{2\rho})] \end{pmatrix} \triangleq \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{pmatrix}。$$

显然，

$$\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial m} \frac{\partial m}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial \rho} & \frac{\partial f_1}{\partial m} & \frac{\partial f_1}{\partial \varepsilon} \\ \frac{\partial f_2}{\partial \rho} & \frac{\partial f_2}{\partial m} & \frac{\partial f_2}{\partial \varepsilon} \\ \frac{\partial f_3}{\partial \rho} & \frac{\partial f_3}{\partial m} & \frac{\partial f_3}{\partial \varepsilon} \end{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x}$$

令

$$A = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial \rho} & \frac{\partial f_1}{\partial m} & \frac{\partial f_1}{\partial \varepsilon} \\ \frac{\partial f_2}{\partial \rho} & \frac{\partial f_2}{\partial m} & \frac{\partial f_2}{\partial \varepsilon} \\ \frac{\partial f_3}{\partial \rho} & \frac{\partial f_3}{\partial m} & \frac{\partial f_3}{\partial \varepsilon} \end{pmatrix} \triangleq \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}} \quad (3)$$

则，Euler 方程可以写为拟线性形式

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + A \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = 0, \quad (4a)$$

其中 A 称为 Jacobi 矩阵，其表达式为

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ (\gamma - 3)\frac{u^2}{2} & (3 - \gamma)u & \gamma - 1 \\ (\gamma - 1)u^3 - \gamma u E & -\frac{3}{2}(\gamma - 1)u^2 + \gamma E & \gamma u \end{pmatrix}。 \quad (4b)$$

对于二阶偏微分方程（组），可以通过降阶的方法化为一阶拟线性方程组。
考虑 Laplace 方程

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} = 0。 \quad (5a)$$

引入

$$u = \frac{\partial \Phi}{\partial x}, \quad v = \frac{\partial \Phi}{\partial y},$$

则 (5) 式可以写为

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \\ \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} = 0 \end{cases},$$

即

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} + \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial y} = 0,$$

其中

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5b)$$

根据类似的方法, Navier - Stokes 方程也可以写为一阶拟线性方程组的形式, 具体做法从略。

注意, 拟线性方程是非守恒型方程。

二、特征线理论, 双曲型方程的定义

考虑一般形式的有两个自变量的拟线性方程 (1) 式, 它也可以写为分量形式:

$$\sum_{j=1}^m b_{i,j} \frac{\partial u_j}{\partial t} + \sum_{j=1}^m a_{i,j} \frac{\partial u_j}{\partial x} = c_i \quad (i=1, 2, \dots, m) \quad (6)$$

在 (6) 式中 t, x 可以是时间和空间变量, 也可以是其他任何有物理意义的自变量。

设 (x, t) 平面上的曲线可定义为

$$\Gamma: \frac{dx}{dt} = \lambda(U(x, t)), \quad (7)$$

则沿曲线 Γ 的全导数 (方向导数) 为:

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{dx}{dt} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \lambda \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (8)$$

如果, 对 (6) 式作某种线性组合, 使得经组合后的方程只包含沿 Γ 的全导数, 则组合后的方程实际上化为在 Γ 上的常微分方程。满足这种条件的曲线 Γ 称为特征线, 而特征线上的常微分方程称为特征相容关系。例如: 标量线性波动方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (a = \text{const}) \quad (9)$$

沿 Γ 的全导数为

$$\frac{Du}{Dt} = \frac{\partial u}{\partial t} + \lambda \frac{\partial u}{\partial x}。$$

显然，当 $\lambda = a$ 时，有

$$\frac{Du}{Dt} = \frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (10)。$$

即 (9) 式可以化为直线 $\Gamma: \frac{dx}{dt} = a$ 上的常微分方程 $\frac{Du}{Dt} = 0$ 。则 $\Gamma: \frac{dx}{dt} = a$ 称为 (9)

式的特征线， $\frac{Du}{Dt} = 0$ 称为特征线上的特征相容关系。事实上，把 $\frac{Du}{Dt} = 0$ 沿特征

线积分，有 $u|_{\Gamma} = \text{const}$ 。对于 (9) 式的初值问题，当初值为

$$u(x, 0) = u_0(x)$$

时，由 $u|_{\Gamma} = \text{const}$ ，我们可以导出 (9) 式的解析解为

$$u(x, t) = u_0(x - at)。$$

可见，通过引入特征线和相容关系，可以把偏微分方程的某种线性组合化为常微分方程，在有些特殊情况下，还可以由此得到解析解。因此，分析拟线性方程的特征线和相容关系具有重要意义。

下面讨论一般的两个自变量一阶拟线性方程的特征问题。把 (6) 式作线性组合

$$\sum_{i=1}^m l_i [\sum_{j=1}^m b_{i,j} \frac{\partial u_j}{\partial t} + \sum_{j=1}^m a_{i,j} \frac{\partial u_j}{\partial x} - c_i] = 0, \quad (10)$$

其中 $l_i (i=1, 2, \dots, m)$ 为线性组合系数。(10) 式可以整理为：

$$\sum_{j=1}^m [(\sum_{i=1}^m l_i b_{i,j}) \frac{\partial u_j}{\partial t} + (\sum_{i=1}^m l_i a_{i,j}) \frac{\partial u_j}{\partial x}] = \sum_{i=1}^m l_i c_i。$$

如果 $\forall j$ ，有

$$\frac{\sum_{i=1}^m l_i a_{i,j}}{\sum_{i=1}^m l_i b_{i,j}} = \lambda, \quad (11)$$

则有

$$\sum_{j=1}^m [(\sum_{i=1}^m l_i b_{i,j}) (\frac{\partial u_j}{\partial t} + \lambda \frac{\partial u_j}{\partial x})] = \sum_{i=1}^m l_i c_i,$$

或

$$\sum_{j=1}^m [(\sum_{i=1}^m l_i b_{i,j}) \frac{Du_j}{Dt}] = \sum_{i=1}^m l_i c_i. \quad (12)$$

即 $\Gamma: \frac{dx}{dt} = \lambda$ 是一条特征线, (12) 式为特征相容关系。由于 $\forall j$, (11) 式成立, 所以有

$$\sum_{i=1}^m l_i (a_{i,j} - \lambda b_{i,j}) = 0, \quad j = 1, 2, \dots, m. \quad (13)$$

令

$$\mathbf{l} = (l_1, l_2, \dots, l_m)$$

则 (13) 式可以写为矩阵形式

$$\mathbf{l}(A - \lambda B) = 0 \quad (14a)$$

或

$$(A^T - \lambda B^T) \mathbf{l}^T = 0. \quad (14b)$$

注意到 \mathbf{l}, \mathbf{l}^T 分别为 m 维的行向量和列向量, \mathbf{l} 称为左特征向量。(14) 式是一个齐次方程, 为了使 $\mathbf{l} = (l_1, l_2, \dots, l_m)$ 有解, 必须满足

$$|A - \lambda B| = 0. \quad (15)$$

上述行列式方程是一个关于 λ 的 m 次代数方程, 共有 m 个解, 称为特征值 λ_k ($k = 1, 2, \dots, m$)。显然, λ_k 是 U 的函数。在求得 λ_k 后, 由 (14) 式, 我们可以得到和 λ_k 对应的左特征向量记为 \mathbf{l}^k , 对应的特征相容关系可以写为

$$\mathbf{l}^k B \left(\frac{DU}{Dt} \right) \Big|_k = \mathbf{l}^k B \left(\frac{\partial U}{\partial t} + \lambda_k \frac{\partial U}{\partial x} \right) = \mathbf{l}^k \mathbf{C}. \quad (16)$$

我们考虑这样一种特殊情况: (15) 式的 m 个解全部为实数, 且存在 m 个独立 (线性无关) 的左特征向量。此时, 一阶拟线性偏微分方程组和 m 条特征线上的 m 个特征相容关系 (常微分方程) 是等价的。也就是说, 一阶拟线性偏微分方程组可以化为特征线上的 m 个常微分方程。我们定义具有这种性质的一阶拟线性偏微分方程组称为双曲型方程 (组)。双曲型方程的特点将在本节后续内容中介绍。

下面, 简单的介绍一下判定一个拟线性方程组是否为双曲型方程需要的数学知识。

定理一、如果 $|A - \lambda B| = 0$ 有 m 个互不相同的实根, 则他们对应的左特征向量必然线性无关。

通过这个定理，我们知道，如果 $|A - \lambda B| = 0$ 有 m 个互不相同的实根，对应的拟线性方程必为双曲型方程。我们也称这种双曲型方程为严格双曲型方程。

定理二、如果 $|A - \lambda B| = 0$ 有 m 个实根，但其中有重根，则对应的拟线性方程为双曲型的充分必要条件是：每个 k 重根对应着 k 个线性无关的特征向量。

那么，如何判断 k 重根是否对应着 k 个线性无关的特征向量呢？这需要用到线性代数中关于基础解系的知识。考虑一般的 m 阶齐次线性方程组

$$AX = 0, \quad (17)$$

X 是 m 维列向量。上述齐次方程的一组解 X_1, X_2, \dots, X_n 称为 (17) 式的基础解系，

如果：(17) 式的任意解均可表示为 X_1, X_2, \dots, X_n 的线性组合，且 X_1, X_2, \dots, X_n 线性无关。

定理三、 $AX = 0$ 有非零解时，则有基础解系，且基础解系中线性无关解的个数为 $n = m - r$ ， r 为 A 的秩。

定理四、矩阵 A 的秩是 r 的充分必要条件是：矩阵 A 有一个 r 阶子式不为零，同时所有 $r+1$ 阶子式均为零。

具体到拟线性方程类型的判别，通过上面的讨论我们知道：如果 λ 是 (15) 式的一个 k 重根，则 λ 对应着 k 个线性无关的特征向量的充分必要条件是：矩阵 $A - \lambda B$ 的秩为 $r = m - k$ 。

三、抛物型方程和椭圆型方程的定义

根据双曲型方程的定义，我们可以延伸出抛物型方程和椭圆型方程的定义。应该指出，对于一般的一阶拟线性方程而言，抛物型方程和椭圆型方程的定义在数学上是不甚严格的，本书中的提法，和教科书上的常见提法不尽相同。

抛物型方程：对一阶拟线性方程 (1)，如果 $|A - \lambda B| = 0$ 有 m 个实根，但是线性无关的特征向量数小于 m ，则称 (1) 为抛物型的。特别的，当 $|A - \lambda B| = 0$ 的所有根均为重根，而且每一组 k 重根对应的独立特征向量数均小于 k ，则称 (1) 称为严格抛物型的。除了严格抛物型方程以外的抛物型方程，有人也称为抛物 - 双曲混合型。

椭圆型方程：对一阶拟线性方程 (1)，如果 $|A - \lambda B| = 0$ 有复数根，则称 (1) 为椭圆型的。特别的，当 $|A - \lambda B| = 0$ 的所有根均为复数，则称 (1) 为严格椭圆型的。如果 $|A - \lambda B| = 0$ 有部分复数根，部分实数根，则称 (1) 为混合型的。根据实数根的特点可以分为椭圆 - 双曲，椭圆 - 抛物，椭圆 - 抛物 - 双曲等混合类型。

四、偏微分方程分类实例

1. 一维非定常 Euler 方程

由 (4) 式, 知 $B = I$ (单位阵), 且

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ (\gamma-3)\frac{u^2}{2} & (3-\gamma)u & \gamma-1 \\ (\gamma-1)u^3 - \gamma u E & -\frac{3}{2}(\gamma-1)u^2 + \gamma E & \gamma u \end{pmatrix}.$$

求解方程

$$|A - \lambda I| = 0,$$

可以得到三个相异实根 (矩阵 A 的特征值)

$$\lambda_1 = u - a, \lambda_2 = u, \lambda_3 = u + a,$$

其中 $a = \sqrt{\gamma p / \rho}$ 是音速。显然一维非定常 Euler 方程是双曲型方程。

2. Laplace 方程

由 (5) 式,

$$B = I, \quad A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

求解方程

$$|A - \lambda I| = 0,$$

得

$$\lambda_1 = i, \lambda_2 = -i \quad (i : \text{虚数单位}).$$

因此, Laplace 方程是椭圆型方程。

3. 二维定常理想流体流动的 Euler 方程

$$\left\{ \begin{array}{l} u \frac{\partial \rho}{\partial x} + v \frac{\partial \rho}{\partial y} + \rho \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = 0 \\ u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} \\ u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} \\ u \frac{\partial p}{\partial x} + v \frac{\partial p}{\partial y} - a^2 \left(u \frac{\partial \rho}{\partial x} + v \frac{\partial \rho}{\partial y} \right) = 0 \\ a^2 = \gamma \frac{p}{\rho} \end{array} \right.$$

写成拟线性形式：

$$A \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} + B \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial y} = 0 \quad \text{或} \quad \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} + C \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial y} = 0$$

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ u \\ v \\ p \end{pmatrix} \quad A = \begin{pmatrix} u & \rho & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 & 1/\rho \\ 0 & 0 & u & 0 \\ 0 & \rho & 0 & u \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} v & \rho & 0 & 0 \\ 0 & v & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v & 1/\rho \\ 0 & 0 & \rho & v \end{pmatrix}$$

$$C = A^{-1}B = \begin{pmatrix} \frac{v}{u} & -\frac{\rho v}{u^2 - a^2} & \frac{\rho u}{u^2 - a^2} & \frac{v}{u(u^2 - a^2)} \\ 0 & \frac{uv}{u^2 - a^2} & -\frac{a^2}{u^2 - a^2} & -\frac{v}{\rho(u^2 - a^2)} \\ 0 & 0 & \frac{v}{u} & \frac{1}{\rho u} \\ 0 & -\frac{\rho v a^2}{u^2 - a^2} & \frac{\gamma \rho u}{u^2 - a^2} & \frac{uv}{u^2 - a^2} \end{pmatrix}.$$

求 $|C - \lambda I| = 0$ ，即

$$\left(\frac{v}{u} - \lambda \right)^2 \{ [uv - \lambda(u^2 - a^2)]^2 - a^2(u^2 + v^2) + a^4 \} = 0$$

得矩阵 C 的特征值为：

$$\lambda_{1,2} = \frac{v}{u}$$

$$\lambda_{3,4} = \frac{uv \pm a\sqrt{u^2 + v^2 - a^2}}{u^2 - a^2}$$

所以，如果：

$$u^2 + v^2 - a^2 > 0 \Leftrightarrow M > 1 \text{ (超音速)}$$

则有四个实根,可以证明也存在四个线性无关的特征向量,所以方程是双曲型的。如果,

$$u^2 + v^2 - a^2 < 0 \Leftrightarrow M < 1 \text{ (亚音速)}$$

有一对复根,方程是椭圆型的(或椭圆 - 双曲型)。如果

$$u^2 + v^2 - a^2 = 0 \Leftrightarrow M = 1 \text{ (音速)},$$

方程 $|C - \lambda I| = 0$ 有两组重根,而第二组重根

$$\lambda_{3,4} = \frac{uv}{u^2 - a^2}$$

只对应一个线性无关的特征向量,所以方程是抛物型(或抛物 - 双曲型)的。

可见,定常的 Euler 方程在流动参数不同时,可以为不同的类型;也就是说,在流场的不同区域,方程的类型可能不同。这一特点,给数值求解定常的 Euler 方程带来了很大困难,因为我们以后介绍的数值方法往往只对某一种类型的方程适用。虽然这一困难,在 70 年代由 Murman - Cole 部分解决,但是目前很少有人直接求解这种定常的 Euler 方程。

4. 二维非定常理想流体流动的 Euler 方程

首先把方程写为拟线性形式

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + A \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} + B \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial y} = 0$$

我们看到,这个方程有三个自变量,那么如何分析它的类型呢?当然,我们可以把前面的两个自变量的特征分析方法推广到多个自变量的情况,然后类似的得到方程类型的判别方法。但是这种方法比较复杂。在这里,我们采用一种简化的分析方法,即只考虑两个自变量,而把与其他自变量有关的项移到方程的右侧,看作源项。在 $x-t$ 平面, A 的特征值为

$$\lambda_1 = u - a, \lambda_2 = u, \lambda_3 = u, \lambda_4 = u + a,$$

且有四个独立的特征向量,所以在 $x-t$ 平面,非定常 Euler 方程为双曲性的。同样,在 $y-t$ 平面,非定常 Euler 方程也是双曲性的。可见,在考虑非定常项后,

Euler 方程是一个双曲型方程,这给数值求解带来了很大方便。双曲型方程的特点是在时间方向推进求解。那么,如果我们要计算的是一个定常问题,如何利用非定常的 Euler 方程进行计算呢?答案是,我们同计算非定常流动一样,沿时间方向推进求解,当时间足够长后,解不再随时间变化,我们得到的就是定常解。这种方法称为求解定常问题的时间相关方法,是目前求解定常流动的主流方法。

5 . 定常不可压缩 Navier –Stokes 方程

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0$$

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)$$

$$u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right)$$

采用降阶法：令：

$$f = \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{\partial v}{\partial y}$$

$$g = \frac{\partial u}{\partial y} \quad ,$$

$$h = \frac{\partial v}{\partial x}$$

有：

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial g}{\partial y} \right) = uf + vg$$

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{\partial h}{\partial x} - \frac{\partial f}{\partial y} \right) = uh - vf$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{\partial g}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial h}{\partial y} = 0$$

这样，可以把定常不可压缩 Navier –Stokes 方程写为拟线性形式。分析的结果是方程为椭圆型。

6. 其他方程

下面，我们直接给出其他常见流体力学方程的类型，分析的过程从略。

- 1) 非定常不可压缩 Navier –Stokes 方程：椭圆 - 抛物 - 双曲型；
- 2) 定常可压缩 Navier –Stokes 方程：椭圆形；
- 3) 非定常可压缩 Navier –Stokes 方程类：抛物型（抛物 - 双曲型）；
- 4) 边界层方程：抛物型；
- 5) 定常可压缩抛物化 N–S 方程：抛物型。

所谓抛物化 N–S 方程，就是利用边界层流动的概念，设 X 方向为主流方向，考虑到

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \ll \frac{\partial^2}{\partial y^2}$$

把定常可压缩 Navier –Stokes 方程流动方向的二阶偏导数略去。（注意与边界层方程不同的是一阶偏导数都将保留！结论是定常 N-S 方程此时变为抛物型方程。

五、偏微分方程的数学性质

为什么我们要讨论偏微分方程的分类呢？答案是不同类型的方程，如双曲、抛物、椭圆型方程有着不同的数学行为，对应着不同的物理过程，因而，在 CFD 中也应采用不同的方法求解。下面，我们对三种不同类型的方程进行逐一讨论。

1. 双曲型方程。

考虑有两个自变量的双曲型方程，以一维非定常 Euler 方程为例。如下图所示，

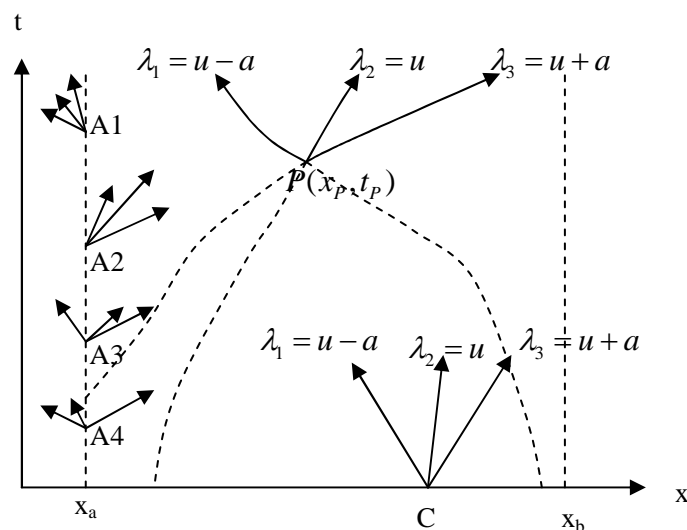


图 1

求解域为 $[x_a, x_b]$ 。由于一维非定常 Euler 方程是双曲型方程，因此与三条特征线上的三个特征相容关系等价。由于在特征线上，不同时刻的物理量之间满足一定的关系，我们可以知道：（1）每个特征相容关系携带了偏微分方程的部分信息，在相应的特征线上传播，信息传播的速度就是 λ_k ($k=1,2,3$)。（2）三条特征线上的特征相容关系综合起来，和原来的偏微分方程是等价的。具体地说，如果我们知道过 P 点的三条特征线上在 $t_p - dt$ ($dt > 0$) 时刻物理量的值，则可以通过求解由三个相容关系组成的常微分方程组，解出 P 点的物理量。这种方法，在气体

力学中称为特征线法。根据这一方法, P 点的解只由 $t < t_p$ 时左行特征线、右行特征线围成的区域内物理量分布决定。这个区域, 具体说就是 $t < t_p$ 时 $\lambda = u - a$ 特征线 (左行特征线), $\lambda = u + a$ 特征线 (右行特征线) 和 $x = x_a, x = x_b, t = 0$ 围成的区域, 称为 P 点的依赖域。(3) $t = 0$ 时刻的初始值, 根据特征相容关系, 通过特征线传播, 并影响 $t > 0$ 的区域。由于特征线的存在, 受影响的区域是有限的, 例如, $t = 0$ 时的在 C 点的初始值, 只影响 $t > 0$ 时 $\lambda_1 = u - a$ 特征线 (左行特征线) 和 $\lambda_3 = u + a$ 特征线 (右行特征线) 之间的区域, 这个区域称为 C 点的影响域。如果, C 点的流动参数产生了某种扰动, 那么这种扰动将会以有限的速度 λ_k ($k = 1, 2, 3$) 在 C 点的影响域内传播。同样, 位于 (x_p, t_p) 的 P 点的影响域为 $t > t_p$ 时左行特征线和右行特征线之间的区域。

双曲型方程的另一性质是: 时间变量具有单向型, 即如果 $t_2 > t_1$, 则 t_2 时的解受 t_1 时某个区域内物理量分布的影响, 而 t_1 时的解不受 t_2 时物理量分布的任何影响。因此, 用数值方法求解双曲型方程可以沿时间方向推进求解。

双曲型方程的特征线的走向也决定了双曲型方程边界条件的提法。例如, 在图 1 中, $x = x_a$ 边界上的 A1 点, 一维非定常 Euler 方程的三条特征线都指向求解域以外, 在这样的边界上, 我们不能提任何边界条件, 因为, A1 点的解可由求解域内 $t < t_{A1}$ 时的解和三条特征线上的相容关系解出。一旦我们在这点给定了边界值, 但和由特征关系得到的解矛盾, 则定解问题不适定。在 A2 点, 三条特征线均指向求解域内, 即没有一条特征线从求解域内指向该点, 则我们必须在 A2 点提三个边界条件。与以上分析类似, A3 点有两条特征线指向求解域内, 要提两个边界条件, 而 A4 点只能提一个边界条件。如果提过多的边界条件, 在确定边界值时, 就可能出现超定的问题, 造成定解问题不适定。

对于二维定常超音速 Euler 方程, 如果主要的流动方向沿 x 轴方向, 即 x 方向流动是超音速的, 方程为双曲型。此时, 方程中 x 变量所起的作用和非定常 Euler 方程中时间变量所起的作用相同; 此时某一点的影响域, 在气体力学中被称为马赫锥。对于一般的双曲型方程, 总有一个时间或类似时间的变量, 方程可以沿这个方向推进求解。

流体力学中的双曲型方程:
非定常 Euler 方程,
定常超音速 Euler 方程。

双曲型模型方程:

$$\text{线性对流方程: } \frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (a = \text{const}),$$

非线性对流方程（Burgers 方程） $\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0$ 。

所谓模型方程，是与流体力学基本方程有一定关系的简单方程，他们不一定对应一种真实的流动，但是形式简单，常常是标量方程，便于构造、分析数值计算方法。

2. 抛物型方程

抛物型方程和双曲型方程的重要区别是：由于抛物型方程独立的特征向量数少于特征值数，因此，特征相容关系所包含的信息少于原抛物型偏微分方程的信息，即抛物型方程不可能用特征线方法求解。一方面，抛物型方程的特征值均为实数，时间变量（或类似时间变量）有单向性，可以用推进的方法求解；另一方面，不能被特征相容关系所包含的信息不可能写为某一特征线上的常微分方程，只能以偏微分方程的形态存在，对以后时刻的整个求解域发生影响；因此，抛物型方程的影响域与双曲型方程不同。如，图 2 中 P 点的影响域是 $t > t_p$ 时的整个求解域（阴影部分）。

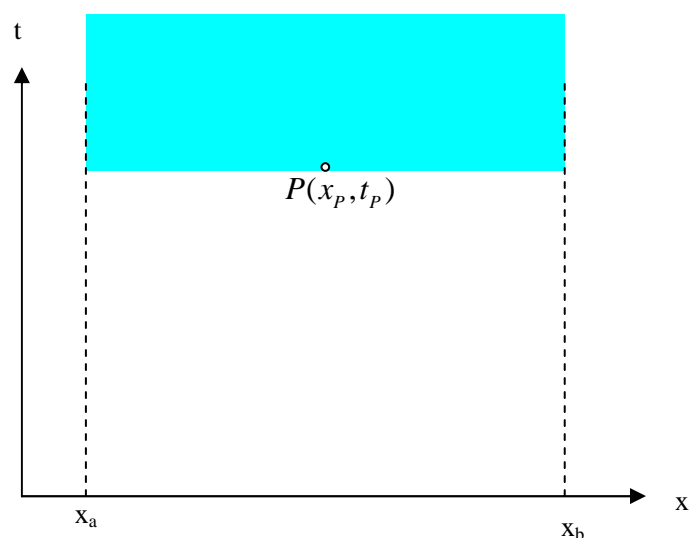


图 2

流体力学中的抛物型方程：

定常边界层方程；

抛物化 Navier - Stokes 方程；

非定常可压缩 Navier - Stokes 方程。（抛物 - 双曲型）

抛物型模型方程：

非定常热传导方程： $\frac{\partial u}{\partial t} = \gamma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (\gamma > 0)$ ；

线性对流 - 扩散方程： $\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = \gamma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ ($a = \text{const}, \gamma = \text{const} > 0$) ;

(抛物 - 双曲型)

非线性对流 - 扩散方程 (粘性 Burgers 方程) :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = \gamma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (\gamma = \text{const} > 0)。$$
 (抛物 - 双曲型)

3. 椭圆型方程

上面讨论的双曲型和抛物型方程，时间变量（或类时间变量）有单向性，可以推进求解。在物理上，他们对应了随时间演化的发展过程，称为发展方程。而严格椭圆型方程由于其特征值均为复数，所以，特征线、相容关系等均无定义；不能沿某一方向推进求解（必须整个求解域同时求解）；也不存在有限的影响域和依赖域，或者说，任何一点的影响域和依赖域都是整个求解域。在物理上，严格椭圆型方程对应着一种稳态平衡的过程，称为平衡方程。对于非严格的椭圆型方程，如椭圆 - 双曲混合型方程，某些组成部分可以延时间或类时间方向推进求解，而另外一些组成部分只能全场同时求解。

流体力学中的椭圆型方程：

定常亚音速 Euler 方程；

定常可压缩（不可压缩） Navier - Stokes 方程；

非定常不可压缩 Navier - Stokes 方程。（椭圆 - 抛物 - 双曲型）

椭圆型模型方程：

$$\text{定常热传导方程 (Laplace 方程) : } \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 ;$$

$$\text{有热源的定常热传导方程 (Poisson 方程) : } \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = s(x, y)。$$

第二章 有限差分 and 有限体积方法基础

§1 有限差分方法概述：实例分析

一、基本方程和定解问题

在本节中，我们以一维非定常热传导方程为例，研究有限差分方法的一些基本内容。

一维非定常热传导方程为：

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \gamma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (\gamma > 0) \quad (1)$$

我们研究该方程的初边值问题，求解域为： $(x, t) \in [0, 1] \times [0, \infty]$ ，初始条件和边界条件为：

$$\begin{aligned} u(x, 0) &= f(x) \\ u(0, t) &= a(t) \\ u(1, t) &= b(t) \end{aligned} \quad (2)$$

这里的边界条件为第一类边界条件（Dirichlet 条件）。方程和初边值条件构成了一个适定的定解问题。

下面，我们研究如何用有限差分方法，近似求解这一问题。那么，什么是有限差分方法呢？对于一个偏微分方程，如果把方程中的所有偏导数近似的用代数差商（algebraic difference quotient）代替，则可以用一组代数方程近似的替代这个偏微分方程，进而得到数值解，这种方法称为有限差分方法（method of finite difference）。差商的意义将在下面介绍。

二、求解域及偏导数的离散化。

为了用有限差分方法求解（1）式，需要把（1）式中的偏导数表示为代数形式，为此，首先要把自变量从连续的分布变为离散形式。这一过程，称为求解域的离散化（discretization）。

1. 空间求解域的离散化

把空间求解域分为 M 段，为了使以后的描述更为简单，这里作均匀剖分。这样，空间求解域共有 $M + 1$ 个点，称为网格点，编号为

$$x_0, x_1, \dots, x_M。$$

显然

$$x_k = k \Delta x，$$

其中 $\Delta x = 1/M$ 称为空间步长。

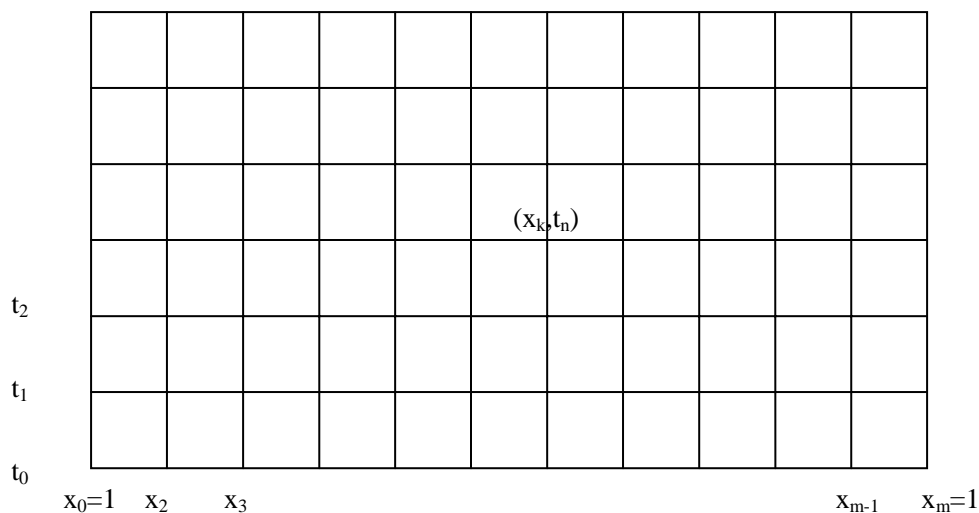


图 1

2. 时间变量的离散化

我们对 $t = T$ 以前的 (1) 式的数值解感兴趣，和空间离散类似，把这段时间分为 N 等分，则时间方向的求解域可以划分为

$$t_0, t_1, t_2, \dots, t_N$$

个离散时刻。显然

$$t_n = n\Delta t,$$

其中 $\Delta t = T / N$ 为时间步长。

3. 解的离散表示

通过上述步骤，我们把求解域划分为一系列离散的时空网格点（图 1）。我们的目标是：求出所有网格点上物理量 u 的近似解

$$u(x_k, t_n) = u(k\Delta x, n\Delta t) \\ (k = 0, 1, \dots, M, n = 0, 1, \dots, N)^\circ$$

为了行文简明，在 CFD 中，常把 $u(x_k, t_n)$ 记为 u_k^n 。

4. 导数的数值逼近

在完成求解域离散以后，下一步是把方程中的偏导数项近似表示为代数形式。在 (x_k, t_n) 点，方程 (1) 可以表示为

$$u_t(k\Delta x, n\Delta t) = \gamma u_{xx}(k\Delta x, n\Delta t) \quad (3a)$$

或

$$(u_t)_k^n = \gamma (u_{xx})_k^n \quad (3b)$$

先讨论 u_t 的离散。我们注意到偏导数 u_t 的定义可以写成下面的几种等价形式

$$\begin{aligned} u_t(x, t) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{u(x, t + \Delta t) - u(x, t)}{\Delta t} \\ u_t(x, t) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{u(x, t) - u(x, t - \Delta t)}{\Delta t} \\ u_t(x, t) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{u(x, t + \Delta t) - u(x, t - \Delta t)}{2\Delta t} \end{aligned} \quad \circ$$

当 Δt 足够小时，近似有

$$\begin{aligned} u_t(x, t) &\approx \frac{u(x, t + \Delta t) - u(x, t)}{\Delta t} \\ u_t(x, t) &\approx \frac{u(x, t) - u(x, t - \Delta t)}{\Delta t} \\ u_t(x, t) &\approx \frac{u(x, t + \Delta t) - u(x, t - \Delta t)}{2\Delta t} \end{aligned} \quad \circ$$

在 (x_k, t_n) 点，有

$$(u_t)_k^n \approx \frac{u_k^{n+1} - u_k^n}{\Delta t}, \quad (4a)$$

或

$$(u_t)_k^n \approx \frac{u_k^n - u_k^{n-1}}{\Delta t}, \quad (4b)$$

或

$$(u_t)_k^n \approx \frac{u_k^{n+1} - u_k^{n-1}}{2\Delta t} \quad (4c)$$

(4a)，(4b)，(4c) 分别称为在 (x_k, t_n) 点导数 $(u_t)_k^n$ 的向前差商，向后差商和中心差商近似。对应的，

$$\begin{aligned}\Delta_t u_k^n &= u_k^{n+1} - u_k^n \\ \nabla_t u_k^n &= u_k^n - u_k^{n-1} \\ \bar{\delta}_t u_k^n &= u_k^{n+1} - u_k^{n-1}\end{aligned}$$

分别称为 u 沿时间方向的向前差分（简称前差），向后差分（后差）和中心差分（中心差）。 $\Delta_t, \nabla_t, \bar{\delta}_t$ 分别称为前差，后差和中心差分算子。今后我们统称（4）式为一阶偏导数的差商或差分近似。

与之类似，空间方向的一阶偏导数可以近似为

$$\begin{aligned}(u_x)_k^n &\approx \frac{u_{k+1}^n - u_k^n}{\Delta x} \\ (u_x)_k^n &\approx \frac{u_k^n - u_{k-1}^n}{\Delta x} \circ \\ (u_x)_k^n &\approx \frac{u_{k+1}^n - u_{k-1}^n}{2\Delta x}\end{aligned}$$

空间方向的向前差分，向后差分和中心差分记为

$$\begin{aligned}\Delta_x u_k^n &= u_{k+1}^n - u_k^n \\ \nabla_x u_k^n &= u_k^n - u_{k-1}^n \circ \\ \bar{\delta}_x u_k^n &= u_{k+1}^n - u_{k-1}^n\end{aligned}$$

$\Delta_x, \nabla_x, \bar{\delta}_x$ 分别称为空间方向前差，后差和中心差分算子。以后在不至于引起混淆

的情况下，我们也常略去差分算子的下标，简记为 $\Delta, \nabla, \bar{\delta}$ 等。

（3）中的二阶导数如何近似呢？根据数学分析的知识，我们知道：

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(x + \Delta x) - 2u(x, t) + u(x - \Delta x, t)}{(\Delta x)^2}。$$

所以，二阶导数可以近似为：

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_k^n = \frac{u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n}{(\Delta x)^2}。 \quad (5)$$

$u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n$ 称为二阶中心差分。容易证明：

$$u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n = \Delta(\nabla u_k^n) = \nabla(\Delta u_k^n)。$$

三、差分格式

前面我们已经把（1）式中的偏导数项近似表示为代数形式。可以看到，同一偏导数可以有不同的近似方法。不同的导数近似方法导致求解（1）式的不同的有限差分方法。

首先，我们考虑时间方向用前差近似而空间二阶导数用中心差分近似的情形。把 (4a) 和 (5) 式代入 (3b) 式，并考虑到初始条件和边界条件的离散（边界条件的处理是非常重要的环节，但本例中非常简单），有

$$\begin{cases} \frac{u_k^{n+1} - u_k^n}{\Delta t} = \gamma \frac{u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n}{(\Delta x)^2} & (6a) \end{cases}$$

$$\begin{cases} u_k^0 = f(x_k) \quad (k = 0, 1, \dots, M) & (6b) \end{cases} \quad \circ$$

$$\begin{cases} u_0^l = a(t_l) \quad (l = 0, 1, \dots) & (6c) \end{cases}$$

$$\begin{cases} u_M^l = b(t_l) \quad (l = 0, 1, \dots) & (6d) \end{cases}$$

(6) 式称为方程 (1) 的一个有限差分方程或有限差分格式 (finite difference scheme)，有时也将 (6a) 称为差分格式。具体到这个问题，我们称之为 FTCS (Forward difference in Time, Central difference in Space) 格式。

另外，如果时间方向用后差而空间二阶导数仍用中心差分近似，我们有

$$\begin{cases} \frac{u_k^n - u_k^{n-1}}{\Delta t} = \gamma \frac{u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n}{(\Delta x)^2} & (7a) \end{cases}$$

$$\begin{cases} u_k^0 = f(x_k) \quad (k = 0, 1, \dots, M) & (7b) \end{cases} \quad \circ$$

$$\begin{cases} u_0^l = a(t_l) \quad (l = 0, 1, \dots) & (7c) \end{cases}$$

$$\begin{cases} u_M^l = b(t_l) \quad (l = 0, 1, \dots) & (7d) \end{cases}$$

(7) 式称为 BTCS (Backward difference in Time, Central difference in Space) 格式。在研究数值方法时，我们经常把 t_n 时刻的物理量当作已知量，而把 t_{n+1} 时刻的物理量作为要求解的未知量，按照这一惯例，(7) 式也可以写为：

$$\begin{cases} \frac{u_k^{n+1} - u_k^n}{\Delta t} = \gamma \frac{u_{k+1}^{n+1} - 2u_k^{n+1} + u_{k-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} & (8a) \end{cases}$$

$$\begin{cases} u_k^0 = f(x_k) \quad (k = 0, 1, \dots, M) & (8b) \end{cases}$$

$$\begin{cases} u_0^l = a(t_l) \quad (l = 0, 1, \dots) & (8c) \end{cases}$$

$$\begin{cases} u_M^l = b(t_l) \quad (l = 0, 1, \dots) & (8d) \end{cases}$$

四、差分方程的求解

1. FTCS 格式

FTCS 格式的求解非常简单。(6a) 式可以改写为：

$$u_k^{n+1} = \sigma u_{k+1}^n + (1 - 2\sigma)u_k^n + \sigma u_{k-1}^n, \quad (9)$$

其中 $\sigma = \frac{\gamma \Delta t}{\Delta x^2}$ 。

FTCS 格式的求解过程为：

- 1) 赋初始值。置 $n=0$ ，由初始条件计算 u_k^n ($k=0,1,\dots,M$)。
- 2) 内点数值解计算。由 (9) 式计算 u_k^{n+1} ($k=1,\dots,M-1$)。
- 3) 边界处理。由 (6c), (6d) 式计算 u_0^{n+1} 和 u_M^{n+1} 。
- 4) 推进到下一时刻。令 $n \rightarrow n+1$ ，转 (2)，直至 $t_n \geq T$ 为止。

可见，在 FTCS 格式中，内点的数值解只依赖于前一个时间步的三个点（图 2）。这种类型的格式可以通过简单的递推关系有某一个时间步的值计算出下一

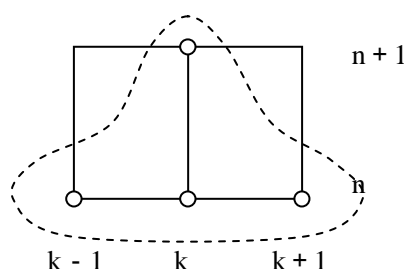


图 2 FTCS 格式

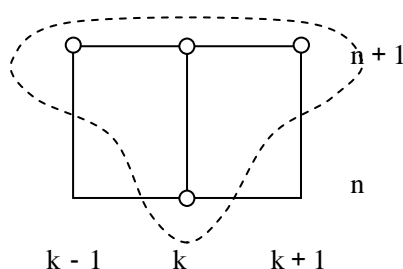


图 3 BTCS 格式

个时间步的值，称为显式格式。图 2 中显示了这种依赖关系，求解 u_k^{n+1} 所涉及的典型网格点称为格式的模板点。

2. BTCS 格式

(8a) 式可以写为：

$$\sigma u_{k+1}^{n+1} - (1-2\sigma)u_k^{n+1} + \sigma u_{k-1}^{n+1} = -u_k^n \quad (10)。$$

与 FTCS 格式不同，BTCS 格式中同时涉及到 $n+1$ 时刻的多个未知量，不能递推求解，这种格式称为隐式格式。图 3 中显示了 BTCS 格式的模板点。那么，BTCS 格式如何求解呢？下面我们分步介绍。

1) 赋初始值。置 $n=0$, 由初始条件计算 u_k^n ($k=0,1,\dots,M$)

2) 构造求解 $n+1$ 时刻数值解的线性方程组。我们列出 $k=0,1,\dots,M$ 各点的差分格式的具体形式：

$$\begin{aligned} k=0: & \quad u_0^{n+1} = a(t_{n+1}) \text{ (边界条件)} \\ k=1: & \quad \sigma u_0^{n+1} - (1+2\sigma)u_1^{n+1} + \sigma u_2^{n+1} = -u_1^n \\ k=2: & \quad \sigma u_1^{n+1} - (1+2\sigma)u_2^{n+1} + \sigma u_3^{n+1} = -u_2^n \\ & \quad \dots\dots \\ k=M-1: & \quad \sigma u_{M-2}^{n+1} - (1+2\sigma)u_{M-1}^{n+1} + \sigma u_M^{n+1} = -u_{M-1}^n \\ k=M: & \quad u_M^{n+1} = b(t_{n+1}) \text{ (边界条件)} \end{aligned}$$

这 $M+1$ 个方程可以写成方程组的形式：

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ \sigma & -(1+2\sigma) & \sigma & & & 0 \\ & \sigma & -(1+2\sigma) & \sigma & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \sigma & -(1+2\sigma) & \sigma \\ & 0 & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0^{n+1} \\ u_1^{n+1} \\ u_2^{n+1} \\ \vdots \\ u_{M-1}^{n+1} \\ u_M^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a(t_{n+1}) \\ -u_1^n \\ -u_2^n \\ \vdots \\ -u_{M-1}^n \\ b(t_{n+1}) \end{pmatrix} \quad (11)$$

显然通过求解这个线性方程组，可以得到 $n+1$ 时刻求解域上各个网格点的数值解。

3) 求解线性方程组 (11) 式。形如 (11) 式的线性方程组，在其系数矩阵中，只有主对角线和相邻的两条次对角线上有非零元素。这种形式的方程组称为三对角线方程组。三对角线方程组可以通过追赶法（或 Thomas 算法）直接求解。具体过程可以参见参考书附录，第 534 页。

4) 推进到下一时刻。令 $n \rightarrow n+1$ ，转 (2)，直至 $t_n \geq T$ 为止。

五 用时间相关方法求解定常问题

考虑如下偏微分方程和定结条件：

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \gamma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (\gamma > 0) \\ u(x, 0) &= f(x) \\ u(0, t) &= a = \text{const} \\ u(1, t) &= b = \text{const} \end{aligned} \quad (12)$$

(12) 式是 (1)、(2) 式的特例，当然可以用前面所述的数值方法求解。但是我们注意到，当 $t \rightarrow \infty$ 时，(12) 式的解与时间无关，为

$$u(x, t) = a + (b-a)x. \quad (13)$$

(13) 式相当于下列定解问题的解

$$\begin{aligned}\gamma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &= 0 \\ u(0) &= a = \text{const}。 \\ u(1) &= b = \text{const}\end{aligned}\quad (14)$$

显然, 定常问题(14)的求解也可以通过求解(12)式实现。在求解(12)式时, 当 $t_n \rightarrow \infty$, 我们就可以得到(14)式的解。在实际求解过程中, 我们无需计算无穷多时间步(在计算机上是不可能的)。只要(12)式的数值解满足

$$\forall k, \left| \frac{u_k^{n+1} - u_k^n}{\Delta t} \right| \leq \varepsilon,$$

其中 ε 是我们指定的一个小的正实数(如 $\varepsilon = 10^{-6}$, 可以根据我们对定常解精度的要求确定), 我们即可认为 $n+1$ 时刻的数值解为定常解。这种方法称为求解定常问题的时间相关法。当应用于求解流体力学基本方程时, 常常可以避免定常流动方程的类型依赖于解的性态这一困难。

六、小结

本节中我们通过一个简单的例子说明了有限差分方法的构造和求解的过程。我们介绍了一些基本的概念和方法。我们还可以进一步思考下面的问题:(1) 求解一个偏微分方程可以有多种数值方法, 那么这些数值方法逼近微分方程的精度如何?(2) 如果想要得到准确可靠的数值解, 对于差分格式有何要求? 是不是任何一种对偏微分方程的近似方法都是可行的? 如何判别“好”和“不好”的数值方法?(3) 差分格式中的 $\Delta x, \Delta t$ 等参数的取值对数值解有何影响? 如此等等。我们将在后续内容中回答这些问题。

§2 导数的数值逼近方法

一、精度分析

上一节我们得到了一阶偏导数的前差、后差和中心差分近似以及二阶导数的中心差分近似。那么, 这些近似方法逼近偏导数的程度如何呢? 我们可以用数学分析中的 Taylor 展开式进行分析。记

$$u(x_i, y_j) = u(i\Delta x, j\Delta y) = u_{i,j}$$

由 Taylor 公式:

$$u_{i\pm 1,j} = u_{i,j} \pm \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{(i,j)} \Delta x + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{(i,j)} \frac{\Delta x^2}{2!} \pm \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Big|_{(i,j)} \frac{\Delta x^3}{3!} + \dots \quad (1)$$

因此，向前差商可以表示为：

$$\begin{aligned} \frac{\Delta_x u_{i,j}}{\Delta x} &= \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} = \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{(i,j)} + T.E. \\ T.E. &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{(i,j)} \frac{\Delta x}{2!} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Big|_{(i,j)} \frac{\Delta x^2}{3!} + \dots = O(\Delta x) \end{aligned} \quad (2)$$

其中 $T.E.$ 称为截断误差 (Truncation Error)。对于向前差商，截断误差是 $O(\Delta x)$ 的

量级，我们称 $\frac{\Delta_x u_{i,j}}{\Delta x}$ 为 $\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{(i,j)}$ 的一阶精度的差分近似。同理，向后差商

$$\begin{aligned} \frac{\nabla_x u_{i,j}}{\Delta x} &= \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x} = \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{(i,j)} + T.E. \\ T.E. &= -\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{(i,j)} \frac{\Delta x}{2!} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Big|_{(i,j)} \frac{\Delta x^2}{3!} + \dots = O(\Delta x) \end{aligned} \quad (3)$$

也为 $\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{(i,j)}$ 一阶精度的差分近似。对于中心差商，我们有

$$\begin{aligned} \frac{\bar{\Delta}_x u_{i,j}}{2\Delta x} &= \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x} = \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{(i,j)} + T.E. \\ T.E. &= \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Big|_{(i,j)} \frac{\Delta x^2}{3!} + \dots = O(\Delta x^2) \end{aligned} \quad (4)$$

可见中心差商的截断误差比前差和后差近似小一个量级。我们称 $\frac{\bar{\Delta}_x u_{i,j}}{2\Delta x}$ 为 $\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{(i,j)}$

的二阶精度的差分近似。不同的近似方法精度不同。一般的说，对偏导数的近似精度越高，差分格式的精度越高。但是，单纯提高精度并不能解决差分格式的所有问题，在构造差分格式时，我们还必须考虑对差分格式的其他要求和偏微分方程的数学行为。

上面考虑的是在 (x, y) 平面上导数的差分近似精度问题。在 (x, t) 平面，分析的方法与之相同。例如，我们在上一节讨论的一维非定常热传导方程的 FTCS 格式中涉及的导数的差分近似的精度为：

$$\begin{aligned} \frac{\Delta_t u_k^n}{\Delta t} &= \frac{u_k^{n+1} - u_k^n}{\Delta t} = \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_k^n + T.E. \\ T.E. &= \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \Big|_k^n \frac{\Delta t}{2!} + \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \Big|_k^n \frac{\Delta t^2}{3!} + \dots = O(\Delta t) \end{aligned} \quad ,$$

$$\frac{u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n}{(\Delta x)^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_k^n + T.E.$$

$$T.E. = \frac{2(\Delta x)^2}{4!} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \Big|_k^n + \frac{2(\Delta x)^4}{6!} \frac{\partial^6 u}{\partial x^6} \Big|_k^n = O((\Delta x)^2)$$

二、导数的差分近似方法 (1): 待定系数法

要构造 $\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{(i,j)}$ 的某种差分近似, 我们可以采用所谓“待定系数法”。在这个方法中, 我们首先要确定近似 $\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{(i,j)}$ 使用的“模板点”。如我们希望通过 $(i, j), (i-1, j), (i-2, j)$

三个点构造 $\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{(i,j)}$ 的差分近似。我们可以把近似公式写成待定系数的形式:

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{(i,j)} - \frac{1}{\Delta x} (au_{i,j} + bu_{i-1,j} + cu_{i-2,j}) = O(\Delta x^k) \quad (5)$$

该式的含义是: 我们希望用 $u_{i,j}, u_{i-1,j}, u_{i-2,j}$ 构造一阶导数 $\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{(i,j)}$ 的 k 阶近似。待定系数法的具体做法是: 把 $u_{i,j}, u_{i-1,j}, u_{i-2,j}$ 在 (i, j) 处作 Taylor 展开, 并代入 (5) 式。

选定一个 k 后, 可以得到关于 a, b, c 的线性方程组, 通过求解这个方程组来确定待定系数。在具体推导中, 可以用所谓“Taylor 表”使过程更为清楚。

表 1 Taylor 表

1	$\Delta x \frac{\partial u}{\partial x} \Big _{(i,j)} - (au_{i,j} + bu_{i-1,j} + cu_{i-2,j}) = O(\Delta x^{k+1}) \quad (6)$				
2		$u_{i,j}$	$\frac{\partial u}{\partial x} \Big _{(i,j)} \Delta x$	$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big _{(i,j)} \Delta x^2$	$\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Big _{(i,j)} \Delta x^3$
3	$\Delta x \frac{\partial u}{\partial x} \Big _{(i,j)}$	0	1	0	0
4	$-au_{i,j}$	$-a$	0	0	0
5	$-bu_{i-1,j}$	$-b$	$-b(-1) \frac{1}{1!}$	$-b(-1)^2 \frac{1}{2!}$	$-b(-1)^3 \frac{1}{3!}$
6	$-cu_{i-2,j}$	$-c$	$-c(-2) \frac{1}{1!}$	$-c(-2)^2 \frac{1}{2!}$	$-c(-2)^3 \frac{1}{3!}$
7	$k=1$	0	0		
8	$k=2$	0	0	0	
9	$k=3$	0	0	0	0

在上表中，第 1 行 (6) 式是推导差分近似的基本方程，它相当于 (5) 式两侧都乘以 Δx 。第 2 行是 Taylor 展开式中导数的阶数和 Δx 量级的乘积。第 3 ~ 6 行第 2 列对应 (6) 式中的各项。第 3 ~ 6 行第 3~6 列是把第 2 列中的相应项写成

$$\alpha_0 u_{i,j} + \alpha_1 \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{(i,j)} \Delta x + \alpha_2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{(i,j)} \Delta x^2 + \alpha_3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Big|_{(i,j)} \Delta x^3$$

的形式后对应的系数 $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ 的值。如第 6 行相当于把 $u_{i-2,j}$ 在 (i, j) 处作 Taylor 展开后 $-cu_{i-2,j}$ 在展开式中各项的系数。即

$$\begin{aligned} -cu_{i-2,j} &= -cu_{i,j} - c(-2) \frac{1}{1!} \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{(i,j)} \Delta x - c(-2)^2 \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{(i,j)} \Delta x^2 - c(-2)^3 \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Big|_{(i,j)} \Delta x^3 - \dots \\ &= -c[u_{i,j} + (-2\Delta x) \frac{1}{1!} \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{(i,j)} + (-2\Delta x)^2 \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{(i,j)} + (-2\Delta x)^3 \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Big|_{(i,j)} + \dots] \end{aligned}$$

因此，第 3~6 行第 3~6 列沿列求和就是 (6) 式左侧作 Taylor 展开后，展开式各项的系数。第 7~9 行为对于确定的 k ，哪些项的系数的和应为零。

$k=1$ 时，比较 (6) 式的左右两侧，我们知道展开式中 $u_{i,j}$ ， $\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{(i,j)} \Delta x$ 项的系数应为零，即

$$\begin{aligned} a + b + c &= 0 \\ b + 2c + 1 &= 0 \end{aligned} \quad (7)$$

此时，有两个方程，三个未知数，因此 (7) 式有无穷多解。也就是说，用三个点 $u_{i,j}, u_{i-1,j}, u_{i-2,j}$ 可以构造一阶导数 $\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{(i,j)}$ 的无穷多种一阶差分近似。或者说，用 $u_{i,j}, u_{i-1,j}, u_{i-2,j}$ 构造 $\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{(i,j)}$ 的一阶差分近似可以带一个自有参数。由 (7) 式，我们有：

$$\begin{aligned} a &= 1 + c \\ b &= -1 - 2c \end{aligned}$$

则

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{(i,j)} = \frac{1}{\Delta x} [(1+c)u_{i,j} - (1+2c)u_{i-1,j} + cu_{i-2,j}] + O(\Delta x)。 \quad (8)$$

当 $c=0$ 时，(8) 式就是我们熟知的后差近似。

$k=2$ 时，比较 (6) 式的左右两侧，我们知道展开式中 $u_{i,j}$ ， $\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{(i,j)} \Delta x$ 和

$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{(i,j)} \Delta x^2$ 项的系数应为零，即

$$\begin{aligned} a + b + c &= 0 \\ b + 2c + 1 &= 0。 \quad (9) \\ b + 4c &= 0 \end{aligned}$$

由此我们可以唯一的解出

$$a = 3/2, b = -2, c = 1/2$$

即

$$\frac{\partial u}{\partial x}\bigg|_{(i,j)} = \frac{1}{2\Delta x} [3u_{i,j} - 4u_{i-1,j} + u_{i-2,j}] + O(\Delta x^2)。(10)$$

(10) 式也称 $\frac{\partial u}{\partial x}\bigg|_{(i,j)}$ 二阶后差近似。

当 $k=3$ 时，有三个待定系数，四个方程。此时方程无解，也就是说，我们不可能用 $u_{i,j}, u_{i-1,j}, u_{i-2,j}$ 构造出 $\frac{\partial u}{\partial x}\bigg|_{(i,j)}$ 的三阶差分近似。一般的，在网格均匀时，用 k 个连续的模板点逼近 $\frac{\partial u}{\partial x}\bigg|_{(i,j)}$ 的精度最高为 $k-1$ 阶。

待定系数法也可以应用于高阶导数的近似和网格不均匀的情形。

三、导数的差分近似方法 (2)：差分算子法

1. 差分算子的定义

所谓算子是一种前置运算符。算子和它后面的作用量一起代表一种确定的运算过程。如前面讨论过的前差算子 Δ_x ，它作用于 u_k^n 后的意义为 $\Delta_x u_k^n = u_{k+1}^n - u_k^n$ 。引入算子的目的是简化各种运算的形式及推导过程。算子之间也可以定义各种运算，如算子的加法和乘法。以前差和后差算子为例：

$$\begin{aligned} (\Delta + \nabla)u_k^n &= \Delta(u_k^n) + \nabla(u_k^n) = u_{k+1}^n - u_{k-1}^n \\ (\Delta \nabla)u_k^n &= \Delta(\nabla u_k^n) = \nabla u_{k+1}^n - \nabla u_k^n = u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n \end{aligned}$$

特别的，如果两个算子 L_1, L_2 (α, β 为实数) 满足

$$(\alpha L_1 + \beta L_2)u = L_1(\alpha u) + L_2(\beta u),$$

则称 L_1, L_2 为线性算子。算子的运算所遵循的规律与算子代表的运算的意义密切相关。线性算子满足加法的交换律和乘法的结合律。但是否满足乘法的交换律则与算子的意义有关。有些算子满足乘法交换律。如我们可以验证 $(\Delta \nabla)u_k^n = (\nabla \Delta)u_k^n$ ，此时我们称 $\Delta \nabla = \nabla \Delta$ 。有些算子不满足乘法交换律。如矩阵 A, B 也可以看作一个算子 (而且是线性算子)，它们作用于列向量 X 后代表对 X 的线性变换。一般 $(AB)X \neq (BA)X$ ，所以 $(AB) \neq (BA)$ 。总之，对于算子的运算规律我们应根据算子的具体意义确定。

下面我们定义一些差分方法中常用的算子：
移位算子：

$$E_x^\alpha u_j^n = u_{j+\alpha}^n$$

$$E_t^\beta u_j^n = u_j^{n+\beta}$$

当移位为+1 时，上标可省略，如 $E_x^1 = E_x$ 。

算术平均算子：

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

$$\mu_x = \frac{1}{2}(E_x^{-\frac{1}{2}} + E_x^{\frac{1}{2}})$$

前差算子：

$$\Delta_x u_j^n = u_{j+1}^n - u_j^n = (E_x - 1)u_j^n$$

$$\Delta_x = E_x - 1$$

后差算子：

$$\nabla_x u_j^n = u_j^n - u_{j-1}^n = (1 - E_x^{-1})u_j^n$$

$$\nabla_x = 1 - E_x^{-1}$$

一倍步长中心算子：

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

$$\delta_x = E_x^{\frac{1}{2}} - E_x^{-\frac{1}{2}}$$

两倍步长中心差算子：

$$\bar{\delta}_x u_j^n = u_{j+1}^n - u_{j-1}^n = (E_x - E_x^{-1})u_j^n$$

$$\bar{\delta}_x = E_x - E_x^{-1}。$$

这些差分算子均为线性算子。

2. 差分算子之间的关系

上述差分算子，彼此间的有一定的联系。例如

$$\nabla E = \Delta = \delta E^{\frac{1}{2}}$$

$$\mu\delta = \frac{1}{2}(E - E^{-1})$$

$$\delta^2 = E - 2 + E^{-1} = \Delta \cdot \nabla。$$

所有的差分算子均可用 Taylor 展开来估算截断误差项(余项)的量级。如果差分算子 L 满足

$$Lu = O((\Delta x)^k)$$

我们称 L 具有 $O((\Delta x)^k)$ 量级。例如，

$$\mu_x u_j^n = \frac{1}{2}(u_{j+\frac{1}{2}}^n + u_{j-\frac{1}{2}}^n) = u_j^n + O(\Delta x^2) \quad \Rightarrow \mu = O(1)$$

$$\delta_x u_j^n = u_{j+\frac{1}{2}}^n - u_{j-\frac{1}{2}}^n = O(\Delta x) \quad \Rightarrow \delta = O(\Delta x)$$

$$\bar{\delta}_x u_j^n = u_{j+1}^n - u_{j-1}^n = O(\Delta x) \quad \Rightarrow \bar{\delta} = O(\Delta x)$$

$$\nabla_x u_j^n = u_j^n - u_{j-1}^n = O(\Delta x) \quad \Rightarrow \nabla = O(\Delta x)$$

$$\Delta_x u_j^n = u_{j+1}^n - u_j^n = O(\Delta x) \quad \Rightarrow \Delta = O(\Delta x)$$

3 微分算子与差分算子的关系

$$\text{记微分算子: } \frac{\partial}{\partial t} = D_t \quad \frac{\partial}{\partial x} = D_x \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2} = D_x^2$$

由 Taylor 公式:

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= u_j^n + \Delta t D_t u_j^n + \frac{\Delta t^2}{2!} D_t^2 u_j^n + \frac{\Delta t^3}{3!} D_t^3 u_j^n + \cdots \\ &= (1 + \Delta t D_t + \frac{\Delta t^2}{2!} D_t^2 + \frac{\Delta t^3}{3!} D_t^3 + \cdots) u_j^n \\ &= e^{\Delta t D_t} u_j^n \end{aligned}$$

$$(\text{注意到: } e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} + \cdots \quad -\infty < x < +\infty)$$

因此，

$$E_t u_j^n = e^{\Delta t D_t} u_j^n$$

或

$$E_t = e^{\Delta t D_t}, \quad D_t = \frac{1}{\Delta t} \ln E_t。$$

类似的，

$$E_x = e^{\Delta x D_x}, \quad D_x = \frac{1}{\Delta x} \ln E_x。$$

以 h 表示时间或空间步长，上面的关系可以统一写为：

$$D = \frac{1}{h} \ln E。 \quad (11)$$

二阶微分算子和移位算子之间的关系为：

$$D^2 = DD = D\left(\frac{1}{h} \ln E\right) = \frac{1}{h} D(\ln E) = \frac{1}{h^2} (\ln E)^2$$

或

$$D^2 = \frac{1}{h^2} (\ln E)^2 \quad (12)$$

4. 导数的近似

根据差分算子之间的转换关系，可以建立微分算子与其他差分算子的联系，从而得到导数的数值近似公式。

如构造导数的后差近似。首先导出微分算子和后差算子之间的关系

$$D_x = \frac{1}{\Delta x} \ln E_x = \frac{1}{\Delta x} \ln\left(\frac{1}{1 + \nabla_x}\right) = \frac{1}{\Delta x} \left(\nabla_x + \frac{\nabla_x^2}{2} + \frac{\nabla_x^3}{3} + \frac{\nabla_x^4}{4} + \dots\right)。$$

考虑到后差算子的量级为 $\Rightarrow \nabla = O(h)$ ，我们得到

一阶精度的向后差商算子为 $\frac{1}{\Delta x}(\nabla_x)$ ，即

$$\frac{1}{\Delta x}(\nabla_x)u_j^n = \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} = \frac{\partial u}{\partial x}\bigg|_j^n + O[(\Delta x)]。$$

二阶精度的向后差商算子为 $\frac{1}{\Delta x}(\nabla_x + \frac{\nabla_x^2}{2})$ ，即

$$\frac{1}{\Delta x}(\nabla_x + \frac{\nabla_x^2}{2})u_j^n = \frac{3u_j^n - 4u_{j-1}^n + u_{j-2}^n}{2\Delta x} = \frac{\partial u}{\partial x}\bigg|_j^n + O[(\Delta x)^2]$$

这和 (10) 式是一致的。

又如，构造导数的前差近似，有

$$D_x = \frac{1}{\Delta x} \ln E_x \quad D_x = \frac{1}{\Delta x} \ln E_x = \frac{1}{\Delta x} \ln(1 + \Delta_x) = \frac{1}{\Delta x} \left(\Delta_x - \frac{\Delta_x^2}{2} + \frac{\Delta_x^3}{3} - \frac{\Delta_x^4}{4} + \dots\right)。$$

因此，一阶精度的向前差商算子为 $\frac{1}{\Delta x}(\Delta_x)$ ，二阶精度的向前差商算子为

$\frac{1}{\Delta x}(\Delta_x - \frac{\Delta_x^2}{2})$ 。同理，一阶导数的中心差分近似为

$$\begin{aligned} D_x &= \frac{1}{2\Delta x}(\Delta_x - \frac{\Delta_x^2}{2} + \frac{\Delta_x^3}{3} - \frac{\Delta_x^4}{4} + \dots) + \frac{1}{2\Delta x}(\nabla_x + \frac{\nabla_x^2}{2} + \frac{\nabla_x^3}{3} + \frac{\nabla_x^4}{4} + \dots) \\ &= \frac{\mu}{\Delta x}(\delta_x - \frac{\delta_x^3}{6} + \frac{\delta_x^5}{30} - \dots) \end{aligned}$$

在推导中，我们使用了恒等式

$$\begin{aligned} \nabla + \Delta &= 2\mu\delta \\ \nabla - \Delta &= -(\Delta\nabla) \\ \Delta^2 + \nabla^2 &= (\Delta\nabla)^2 + 2(\Delta\nabla) \end{aligned}$$

因此，二阶精度的中心差商算子为 $\frac{\mu}{\Delta x}\delta_x$ ，四阶精度的中心差商算子为

$$\frac{\mu}{\Delta x}(\delta_x - \frac{\delta_x^3}{6})。$$

下面给出一个用 (12) 式推导二阶导数的中心差分近似的例子。注意到：

$$D_x^2 = \frac{1}{(\Delta x)^2}(\ln E)^2,$$

所以

$$\begin{aligned} D_x^2 &= \frac{1}{(\Delta x)^2}(\Delta_x - \frac{\Delta_x^2}{2} + \frac{\Delta_x^3}{3} - \frac{\Delta_x^4}{4} + \dots)(\nabla_x + \frac{\nabla_x^2}{2} + \frac{\nabla_x^3}{3} + \frac{\nabla_x^4}{4} + \dots) \\ &= \frac{1}{(\Delta x)^2}[\Delta_x \nabla_x + (\frac{\Delta_x \nabla_x^2}{2} - \frac{\nabla_x \Delta_x^2}{2}) + (\frac{\Delta_x \nabla_x^3}{3} + \frac{\nabla_x \Delta_x^3}{3} - \frac{\Delta_x^2 \nabla_x^2}{4}) + \dots] \\ &= \frac{1}{(\Delta x)^2}[\Delta_x \nabla_x - \frac{(\Delta_x \nabla_x)^2}{2} + (\Delta_x \nabla_x)^2 \frac{4\Delta_x \nabla_x + 5}{12} + \dots] \\ &= \frac{1}{(\Delta x)^2}[\delta_x^2 - \frac{\delta_x^4}{12} + \frac{\delta_x^6}{90} - \dots] \end{aligned}$$

在推导中，我们使用了恒等式

$$\begin{aligned} \nabla - \Delta &= -(\Delta\nabla) \\ \Delta^2 + \nabla^2 &= (\Delta\nabla)^2 + 2(\Delta\nabla) \end{aligned}$$

因此，二阶精度的中心差分算子为 $\frac{1}{(\Delta x)^2}\delta_x^2$ ，即：

$$\frac{1}{(\Delta x)^2}\delta_x^2 u_j^n = \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_j^n + O((\Delta x)^2)。$$

四阶精度的中心差分算子为 $\frac{1}{(\Delta x)^2}(\delta_x^2 - \frac{\delta_x^4}{12})$ 。

5. 紧致格式*

从上面的推导可以看出，导数的有限差分近似精度越高，所需模板点数越多。如一般需要 5 个点才能得到四阶精度的差分近似。模板点数多不仅使数值方法变得复杂，也使边界附近的处理更加困难。能否用较少的模板点构造导数的高阶近似呢？下面我们介绍一种方法。由微分算子与差分算子的关系有：

$$D = \frac{\mu}{h}(\delta - \frac{\delta^3}{6} + \frac{\delta^5}{30} - \dots)。$$

即

$$hD = \mu\delta - \frac{\mu\delta^3}{6} + \frac{\mu\delta^5}{30} - \dots$$

显然

$$hD = \mu\delta - \frac{\mu\delta^3}{6} + O(h^5)$$

或

$$hD + \frac{\mu\delta^3}{6} = \mu\delta + O(h^5)。$$

上式可以等价的写为：

$$hD(1 + \frac{\mu\delta^3}{6} \cdot \frac{1}{Dh}) = \mu\delta + O(h^5)。$$

另一方面， $hD = \mu\delta + O(h^3)$ ，所以

$$\begin{aligned} \frac{1}{hD} &= \frac{1}{\mu\delta + O(h^3)} = \frac{1}{\mu\delta \left[1 + \frac{O(h^3)}{\mu\delta} \right]} \\ &= \frac{1}{\mu\delta} (1 - \frac{O(h^3)}{\mu\delta}) = \frac{[1 - O(h^2)]}{\mu\delta} \end{aligned}$$

所以

$$hD \left\{ 1 + \frac{\mu\delta^3}{6} \left[\frac{1}{\mu\delta} (1 - O(h^2)) \right] \right\} = \mu\delta + O(h^5)，$$

即

$$hD\left[1+\frac{\delta^2}{6}+O(h^4)\right]=\mu\delta+O(h^5)。$$

因此

$$D=\frac{\mu\delta}{h\left(1+\frac{\delta^2}{6}\right)}+O(h^4)。(13)$$

由于 μ , δ 算子都只用到三个模板点上的函数值 , 所以这里仅用三个模板点就得到了 4 阶精度格式。(13) 式可以看作微分算子的有理近似 , 称为 Pade 近似 , 基于 Pade 近似的导数近似方法称为紧致格式。

类似的 , 由 $D^2=\frac{1}{h^2}\left(\delta^2-\frac{\delta^4}{12}+\frac{1}{90}\delta^6-\dots\right)$ 可导出二阶偏导数的紧致格式

为 :

$$D^2=\frac{1}{h^2}\frac{\delta^2}{1+\frac{\delta^2}{12}}+O(h^4)。$$

下面我们给出一个紧致格式应用的例子。考虑热传导方程及定解条件 :

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\gamma\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$$u(x,0)=f(x)$$

$$u(0,t)=a(t)$$

$$u(1,t)=b(t)$$

时间方向采用前差近似

$$D_t=\frac{1}{\Delta t}\Delta_t+O(\Delta t) ;$$

空间导数用紧致近似

$$D_x^2=\frac{1}{h^2}\frac{\delta_x^2}{1+\frac{\delta_x^2}{12}}+O(h^4)。(h=\Delta x)$$

代入微分方程后 , 有 :

$$\frac{1}{\Delta t}\Delta_t u_j^n=\gamma\frac{1}{h^2}\frac{\delta_x^2}{1+\frac{\delta_x^2}{12}}u_j^n ,$$

即 :

$$u_j^{n+1} = (\sigma \frac{\delta_x^2}{1 + \frac{\delta_x^2}{12}} + 1) u_j^n$$

把上式等号两侧同乘以 $1 + \frac{\delta_x^2}{12}$ ，有

$$(1 + \frac{\delta_x^2}{12}) u_j^{n+1} = [1 + (\sigma + \frac{1}{12}) \delta_x^2] u_j^n,$$

或

$$\frac{1}{12} u_{j-1}^{n+1} + \frac{10}{12} u_j^{n+1} + \frac{1}{12} u_{j+1}^{n+1} = (\sigma + \frac{1}{12}) u_{j-1}^n + (-2\sigma + \frac{10}{12}) u_j^n + (\sigma + \frac{1}{12}) u_{j+1}^n。$$

可见，这是一个隐式差分格式。考虑到边界条件后，可以组成一个三对角线方程组进而求解出 $\{u_j^{n+1}\}$ 。

§3 差分格式性质 (1)

一、范数的定义及性质

1. 向量范数

实数的大小可以用其绝对值来度量，向量的大小可以用其长度来度量，范数是这些度量指标的推广和抽象。

定义：如果向量 $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n$ 的某个实值函数 $\|\mathbf{x}\|$ 满足：

- (1) 正定性： $\|\mathbf{x}\| \geq 0$ ， $\|\mathbf{x}\| = 0$ 当且仅当 $\mathbf{x} = 0$ ；
- (2) 齐次性：对于任意实数 α ，都有 $\|\alpha \mathbf{x}\| = |\alpha| \|\mathbf{x}\|$ ；
- (3) 三角不等式：对任意 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbf{R}^n$ ，都有 $\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$ 。

则称 $\|\mathbf{x}\|$ 为 \mathbf{R}^n 上 \mathbf{x} 的范数。

常见的向量范数有：

1 范数： $\|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$ ；

2 范数： $\|\mathbf{x}\|_2 = (\sum_{i=1}^n |x_i|^2)^{1/2}$ ；

∞ 范数： $\|\mathbf{x}\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|$ 。

2. 算子范数

设算子 A 可以与向量 $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n$ 作用，则算子 A 的范数定义为：

$$\|A\| = \max_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{\|A\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} = \max_{\|\mathbf{x}\|=1} \|A\mathbf{x}\|。$$

由于 $\|A\mathbf{x}\|$ 是一个向量，所以算子范数可以用相应的向量范数定义。显然

$$\|A\mathbf{x}\| \leq \|A\| \|\mathbf{x}\|。$$

二、差分格式的精度

前面我们已经讨论了导数的差分近似的精度问题，类似的，我们也可以定义差分格式的精度。设微分方程为 $Lu_e = 0$ ，其中微分方程的精确解为 u_e 。对应的

差分格式为 $L_\Delta u_k^n = 0$ ， u_k^n 为差分格式的数值解。一般 $u_k^n \neq (u_e)_k^n$ ，所以 $L_\Delta(u_e)_k^n \neq 0$ 。

我们可以想象 $L_\Delta(u_e)_k^n$ 越小， $L_\Delta u_k^n = 0$ 近似 $L(u_e) = 0$ 的程度越高。所以我们定义差分方程的局部截断误差(local truncation error) 为：

$$L.T.E = |L_\Delta(u_e)_k^n| \quad (1)$$

例：一维非定常热传导方程的 FTCS 格式

$$\frac{u_k^{n+1} - u_k^n}{\Delta t} = \gamma \frac{u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n}{(\Delta x)^2}。$$

把各个物理量在 (k, n) 处作 Taylor 展开，有

$$\begin{aligned} & \frac{u_k^{n+1} - u_k^n}{\Delta t} - \gamma \frac{u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n}{(\Delta x)^2} = \\ & [(\frac{\partial u}{\partial t})_k^n - \gamma (\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_k^n] + \frac{\Delta t}{2} (\frac{\partial^2 u}{\partial t^2})_k^n - \gamma \frac{2(\Delta x)^2}{4!} (\frac{\partial^4 u}{\partial x^4})_k^n \\ & + \frac{(\Delta t)^2}{6} (\frac{\partial^3 u}{\partial t^3})_k^n - \gamma \frac{2(\Delta x)^4}{6!} (\frac{\partial^6 u}{\partial x^6})_k^n + \dots \end{aligned}$$

把精确解 u_e 代入上式，得

$$\begin{aligned} L_{\Delta}(u_e)_k^n &= \frac{(u_e)_{k+1}^n - (u_e)_k^n}{\Delta t} - \gamma \frac{(u_e)_{k+1}^n - 2(u_e)_k^n + (u_e)_{k-1}^n}{(\Delta x)^2} = \\ &= [(\frac{\partial u_e}{\partial t})_k^n - \gamma(\frac{\partial^2 u_e}{\partial x^2})_k^n] + \frac{\Delta t}{2}(\frac{\partial^2 u_e}{\partial t^2})_k^n - \gamma \frac{2(\Delta x)^2}{4!}(\frac{\partial^4 u_e}{\partial x^4})_k^n + \dots \\ &+ \frac{(\Delta t)^2}{6}(\frac{\partial^4 u_e}{\partial t^4})_k^n - \gamma \frac{2(\Delta x)^4}{6!}(\frac{\partial^6 u_e}{\partial x^6})_k^n + \dots \end{aligned}$$

由于 $(\frac{\partial u_e}{\partial t})_k^n - \gamma(\frac{\partial^2 u_e}{\partial x^2})_k^n = 0$ ，所以

$$\begin{aligned} L_{\Delta}(u_e)_k^n &= \frac{\Delta t}{2}(\frac{\partial^2 u_e}{\partial t^2})_k^n - \gamma \frac{2(\Delta x)^2}{4!}(\frac{\partial^4 u_e}{\partial x^4})_k^n + \frac{(\Delta t)^2}{6}(\frac{\partial^4 u_e}{\partial t^4})_k^n - \gamma \frac{2(\Delta x)^4}{6!}(\frac{\partial^6 u_e}{\partial x^6})_k^n + \dots \\ &= O(\Delta t) + O((\Delta x)^2) \end{aligned}$$

即：

$$L.T.E = |L_{\Delta}(u_e)_k^n| = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)。$$

定义：差分格式的精度

如果差分格式 $L_{\Delta}(u) = 0$ 相对于微分方程的局部截断误差为：

$$L.T.E = O((\Delta t)^p) + O((\Delta x)^q)， \quad (2)$$

则称差分格式时间方向是 p 阶精度而空间方向是 q 阶精度。

显然 FTCS 格式时间方向是一阶精度，空间方向是二阶精度。

从上面的过程可以看出，在分析差分格式的截断误差和精度时，无需知道微分方程的精确解。事实上，如果我们认为 $(\frac{\partial u}{\partial t})_k^n - \gamma(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_k^n = 0$ 成立，则在分析时可以略去精确解的下标“ e ”。

下面我们继续分析 FTCS 格式。由于 $(\frac{\partial u}{\partial t})_k^n - \gamma(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_k^n = 0$ ，我们知道

$$u_{tt} = (u_t)_t = \gamma(u_{xx})_t = \gamma(u_t)_{xx} = \gamma^2 u_{xxxx}$$

即

$$(u_{tt})_k^n = \gamma^2 (u_{xxxx})_k^n。$$

因此，

$$L.T.E = \left| \gamma \left(\gamma \frac{\Delta t}{2} - \frac{2(\Delta x)^2}{4!} \right) (\frac{\partial^4 u}{\partial x^4})_k^n + \frac{(\Delta t)^2}{6} (\frac{\partial^4 u}{\partial t^4})_k^n - \gamma \frac{2(\Delta x)^4}{6!} (\frac{\partial^6 u}{\partial x^6})_k^n + \dots \right|$$

当 $\gamma \frac{\Delta t}{2} - \frac{2(\Delta x)^2}{4!} = 0$ 时, $L.T.E = O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^4)$, 即如果时间步长和空间步长

之间满足一定的关系, FTCS 格式时间方向可以达到二阶精度, 空间方向可以达到四阶精度。

三、差分格式的相容性

首先我们进一步讨论一下截断误差的定义。前面, 我们所说的截断误差是在每个网格点上逐点定义的。但是, 在格式的应用中必然涉及多个网格点, 那么差分格式的截断误差究竟由哪一点决定呢? 一个可行的方案是选择所有网格点中截断误差最大的那个点来表征差分格式的截断误差。注意到: 定义在每个网格点上的数值解构成一个解向量, 而每一个网格点上差分格式的截断误差也构成了一个向量。上述方案实际上相当于用截断误差向量的 ∞ 范数来表征差分格式的截断误差。当然, 采用其他范数也是可以的。用范数来刻画差分格式的某些特征具有简单明了, 适于进行数学推演的特点。下面我们给出截断误差的范数形式的定义。

定义: 设每个网格点上数值解构成的解向量为 \mathbf{u}^n , 相应各点上的精确解构成的向量为 \mathbf{u}_e , 与微分方程 $L(\mathbf{u}_e) = 0$ 对应的差分格式为 $L_\Delta(\mathbf{u}^n) = 0$ 。则差分格式的截断误差为: $L.T.E. = \|L_\Delta(\mathbf{u}_e^n)\|$ 。

有了截断误差的定义, 我们就可以定义差分格式的相容性。

定义: 与微分方程 $L(\mathbf{u}_e) = 0$ 对应的差分格式为 $L_\Delta(\mathbf{u}^n) = 0$ 。如果

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0, \Delta t \rightarrow 0} L.T.E. = \lim_{\Delta x \rightarrow 0, \Delta t \rightarrow 0} \|L_\Delta(\mathbf{u}_e^n)\| = 0,$$

则称差分格式与微分方程是相容的。

所谓相容性, 是说当网格间距趋于零时, 差分格式趋近于微分方程。易知, 如果差分格式的截断误差为 $L.T.E = O((\Delta t)^p) + O((\Delta x)^q)$, 则当 $p > 0, q > 0$ 时, 差分格式是相容的。

四、差分格式的收敛性和稳定性

前面关于差分格式精度和相容性的分析原则上适用于所有微分方程的差分格式。现在, 我们把研究的范围缩小, 只考虑线性的发展方程, 如双曲型方程和抛物型方程的差分格式。发展方程的一般形式为

$$\frac{\partial u}{\partial t} + g(u, u_x, \dots) = 0 \quad (3)$$

我们只考虑初值问题，即空间求解域为 $x \in (-\infty, \infty)$ ，或虽然求解域是有限的但在边界处满足周期性条件，即 $x \in [a, b]$, $u(x) = u(x + (b - a))$ 的情形。（第二种情况可以延拓为 $x \in (-\infty, \infty)$ 的情况）。在这些情况下，我们无需考虑边界条件。

考虑非定常热传导方程的 FTCS 格式，

$$L_{\Delta}(u_k^n) = \frac{u_k^{n+1} - u_k^n}{\Delta t} - \gamma \frac{u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n}{(\Delta x)^2} = 0。$$

它可以写为

$$\Delta t L_{\Delta}(u_k^n) = u_k^{n+1} - [\sigma u_{k+1}^n + (1 - 2\sigma)u_k^n + \sigma u_{k-1}^n] = 0。$$

因为是初值问题，所以 $-\infty < k < \infty$ 。我们记 $n+1$ 时刻的解向量为

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^{n+1} &= (\cdots, u_{-1}^{n+1}, u_0^{n+1}, u_1^{n+1}, \cdots)^T \\ \mathbf{u}^n &= (\cdots, u_{-1}^n, u_0^n, u_1^n, \cdots)^T \end{aligned}。$$

则差分格式可以写为

$$\Delta t L_{\Delta}(\mathbf{u}^n) = \mathbf{u}^{n+1} - Q\mathbf{u}^n = 0，$$

Q 是差分算子，在这里实际上是一个三对角矩阵。一般的，发展方程的初值问题的涉及两个时间层的差分格式均可以写为

$$\mathbf{u}^{n+1} - Q\mathbf{u}^n = 0 \quad (4)$$

的形式，且和前面讲到的差分方程的一般形式 $L_{\Delta}(\mathbf{u}) = 0$ 之间的关系是：

$$\Delta t L_{\Delta}(\mathbf{u}^n) = \mathbf{u}^{n+1} - Q\mathbf{u}^n = 0。 \quad (5)$$

差分格式精度表示的是差分方程逼近微分方程的程度，但实际上我们更关心的是：差分方程的解逼近微分方程的精确解的程度。下面我们从一般的意义上讨论这一问题。设微分方程的精确解为 \mathbf{u}_e ，则：

$$\mathbf{u}_e^{n+1} = Q\mathbf{u}_e^n + \Delta t \boldsymbol{\tau}^n。 \quad (6)$$

其中 $\boldsymbol{\tau}^n = L_{\Delta}(\mathbf{u}_e^n)$ ， $\|\boldsymbol{\tau}^n\|$ 为差分方程的截断误差。设精确解和数值解的差为

$\mathbf{w} = \mathbf{u}_e - \mathbf{u}$ ，我们称 $\|\mathbf{w}\| = \|\mathbf{u}_e - \mathbf{u}\|$ 为数值解的全局（或整体）误差。显然，

$$\mathbf{w}^{n+1} = Q\mathbf{w}^n + \Delta t \boldsymbol{\tau}^n。 \quad (7)$$

下面，我们通过（7）式研究差分方程的解逼近微分方程的精确解的程度。反复应用（7）式，有：

$$\begin{aligned}
\mathbf{w}^{n+1} &= Q\mathbf{w}^n + \Delta t \boldsymbol{\tau}^n \\
&= Q(Q\mathbf{w}^{n-1} + \Delta t \boldsymbol{\tau}^{n-1}) + \Delta t \boldsymbol{\tau}^n \\
&\dots \\
&= Q^{n+1}\mathbf{w}^0 + \Delta t \sum_{j=0}^n Q^j \boldsymbol{\tau}^{n-j}
\end{aligned}$$

考虑到： $\mathbf{w}^0 = 0$ ，所以

$$\mathbf{w}^{n+1} = \Delta t \sum_{j=0}^n Q^j \boldsymbol{\tau}^{n-j}。 \quad (8)$$

把 (8) 式两侧取范数，

$$\|\mathbf{w}^{n+1}\| \leq \Delta t \sum_{j=0}^n \|Q^j \boldsymbol{\tau}^{n-j}\| \leq \Delta t \sum_{j=0}^n \|Q^j\| \|\boldsymbol{\tau}^{n-j}\|。$$

$\|\boldsymbol{\tau}^{n-j}\|$ 是在 $n-j$ 时刻的局部截断误差，可以写为 $\|\boldsymbol{\tau}^{n-j}\| = |C_{n-j}|((\Delta t)^p + (\Delta x)^q)$ 。 C_{n-j}

的量级为 $O(1)$ ，因而是有界的。取 $C = \max_{0 \leq j \leq n} |C_{n-j}|$ ，则

$$\|\mathbf{w}^{n+1}\| \leq \Delta t C((\Delta t)^p + (\Delta x)^q) \left(\sum_{j=0}^n \|Q^j\| \right)。 \quad (9)$$

可见，全局误差与差分格式的截断误差有关，而且与差分算子的范数有关。

我们考虑一种特殊情况，即，

$$\forall 0 \leq j \leq n \quad \|Q^j\| < K, \quad (10)$$

其中 $K > 0$ 且与 n 无关，但可能与 t 有关，即 $K = K(t)$ 。此时，

$$\|\mathbf{w}^{n+1}\| \leq (n+1)\Delta t K C((\Delta t)^p + (\Delta x)^q) = O((\Delta t)^p + (\Delta x)^q) \quad (11)$$

即数值解的全局误差的量级为 $O((\Delta t)^p + (\Delta x)^q)$ 。因此，当满足条件 (10) 时，全局误差和局部截断误差量级相同。

根据 (11) 式，在某一确定的时刻 t ，当 $\Delta x \rightarrow 0, \Delta t \rightarrow 0 ((n+1)\Delta t \rightarrow t)$ 时，对于相容的差分格式，有：

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0, \Delta t \rightarrow 0} \|\mathbf{w}^{n+1}\| = 0。$$

即 $\Delta x \rightarrow 0, \Delta t \rightarrow 0$ 时，差分方程的数值解逼近微分方程的精确解。这个性质对于保证差分格式的数值解的有效性是非常重要的。有了这个性质，我们就可以确信，当计算网格足够密时，数值解会相当接近精确解。实际上，上面我们已经得到了

这种性质成立时，差分格式需要满足的条件，即对于任意的 $0 \leq j \leq n$ ， $\|Q^j\| < K$ 。

其中 K 与 n 无关，但可能与 t 有关，即 $K = K(t)$ 。

由此可以引出两个重要的概念：收敛性和稳定性。

定义：收敛性。设微分方程的精确解为 \mathbf{u}_e ，由差分方程得到的数值解为 \mathbf{u} ，

在 t 时刻，当 $\Delta x \rightarrow 0, \Delta t \rightarrow 0 ((n+1)\Delta t = t)$ 时，如果

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0, \Delta t \rightarrow 0} \|\mathbf{w}^{n+1}\| = \lim_{\Delta x \rightarrow 0, \Delta t \rightarrow 0} \|\mathbf{u}_e^{n+1} - \mathbf{u}^{n+1}\| = 0, \quad (12)$$

则称差分格式是收敛的。

定义：稳定性。对差分格式 $\Delta t L_{\Delta}(\mathbf{u}^n) = \mathbf{u}^{n+1} - Q\mathbf{u}^n = 0$ ，如果存在正常数

$\Delta x_0, \Delta t_0$ ，及与 n 无关的 $K = K(t) > 0$ ，使得对于任意的 $n, \Delta t$ ($0 \leq t = (n+1)\Delta t$)，

当 $0 \leq \Delta x \leq \Delta x_0$ ， $0 \leq \Delta t \leq \Delta t_0$ 时，有

$$\|\mathbf{u}^{n+1}\| \leq K \|\mathbf{u}^0\|, \quad (13)$$

则称差分格式是稳定的。

(13) 式表明，稳定性等价于数值解的一致有界性。

定理：差分格式 $\Delta t L_{\Delta}(\mathbf{u}^n) = \mathbf{u}^{n+1} - Q\mathbf{u}^n = 0$ 稳定的充分必要条件是，存在正常

数 $\Delta x_0, \Delta t_0$ ，及 $K = K(t) > 0$ ，使得对于任意的 $n, \Delta t$ ($0 \leq t = (n+1)\Delta t$)，当

$0 \leq \Delta x \leq \Delta x_0$ ， $0 \leq \Delta t \leq \Delta t_0$ 时，有

$$\|Q^{n+1}\| \leq K. \quad (14)$$

这个定理建立了算子范数与稳定性之间的关系，请读者自己证明。

(14) 式和 (10) 式是等价的。因此，一个线性初值问题的相容的差分格式，如果是稳定的，则必然收敛。事实上，我们还可以得到更加完善的结论：

Lax 等价性定理：对于适定的线性偏微分方程的初值问题的一个相容的差分格式，其收敛的充分必要条件是该格式是稳定的。即

$$\text{稳定性} \xrightleftharpoons[\text{初值, 相容}]{\text{适定, 线性}} \text{收敛性}$$

这个定理非常有用，因为直接分析差分格式的收敛性比较困难，而稳定性分析则比较简单。通过这个定理我们知道，在一定条件下，收敛性和稳定性是等价的；通过稳定性分析，即可确定格式的收敛条件。

收敛性的意义非常明确，下面我们主要讨论一下稳定性的意义。从稳定性的定义看，一个差分格式是稳定的，即数值解是一致有界的。而且数值解范数的上界与时间区间 $[0, t]$ 内推进的步数无关。稳定性的意义还可以从另一个角度分析。

考虑差分格式

$$\mathbf{u}^{n+1} - Q\mathbf{u}^n = 0, \quad (15)$$

假定有一种理想的计算机，求解 $\mathbf{u}^{n+1} - Q\mathbf{u}^n = 0$ 可以得到精确的数值解 \mathbf{u} 。但实际上，计算机的字长是有限的。所以我们得到的是近似的数值解 \mathbf{v} 。近似数值解和精确数值解之间的误差称为舍入误差，记为 $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{v} - \mathbf{u}$ 。在计算机上，我们求解的实际上是

$$\mathbf{u}^{n+1} + \boldsymbol{\varepsilon}^{n+1} - Q(\mathbf{u}^n + \boldsymbol{\varepsilon}^n) = 0. \quad (16)$$

由于我们讨论的是线性方程的差分格式，所以 Q 是线性算子。(16) - (15) 得

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{n+1} - Q(\boldsymbol{\varepsilon}^n) = 0. \quad (17)$$

(17) 式为舍入误差满足的方程，它和差分方程形式上是相同的。所以稳定的差分格式必有

$$\|\boldsymbol{\varepsilon}^{n+1}\| \leq K \|\boldsymbol{\varepsilon}^0\| \quad (18)$$

即舍入误差一致有界。 K 与 n 无关保证了舍入误差不会随着推进步数的增多而逐渐积累。

上面我们针对初值问题给出了收敛性和稳定性的定义。事实上，这些定义也适用于初边值问题。但是 Lax 等价性定理一般只对初值问题成立。

§4 发展方程的稳定性分析

一、矩阵（谱）方法

如果一个差分格式可以写为 $\mathbf{u}^{n+1} - Q\mathbf{u}^n = 0$ ，则我们知道其稳定的充要条件是对于任意的 $n, \Delta t$ ($0 \leq t = (n+1)\Delta t$)，当 $0 \leq \Delta x \leq \Delta x_0$ ， $0 \leq \Delta t \leq \Delta t_0$ 时，有

$\|Q^{n+1}\| \leq K$ 。通过算子范数研究稳定性的方法称为矩阵方法，因为算子 Q 一般是一个矩阵。矩阵方法适合初值和初边值问题。

对于一维热传导方程的 FTCS 格式，

$$u_k^{n+1} = \sigma u_{k+1}^n + (1 - 2\sigma)u_k^n + \sigma u_{k-1}^n \quad (k = 1, 2, \dots, M-1)$$

当边界条件为：

$$u_1^n = 0$$

$$u_M^n = 0$$

时, $\mathbf{u}^{n+1} - Q\mathbf{u}^n = 0$ 的具体表达式为:

$$\mathbf{u}^n = \begin{Bmatrix} u_1^n \\ u_2^n \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{M-1}^n \end{Bmatrix}, Q = \begin{Bmatrix} 1-2\sigma & \sigma & & & \\ \sigma & 1-2\sigma & \sigma & & \\ & \sigma & 1-2\sigma & \sigma & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & & \sigma & 1-2\sigma & \sigma \\ & & & & & \sigma & 1-2\sigma \end{Bmatrix}_{(M-1) \times (M-1)}.$$

计算 $\|Q^{n+1}\|$ 通常是比较困难的。我们只研究稳定的充分条件: 当 $\|Q\| \leq 1$ 时, 对于任意向量 \mathbf{b}

$$\|Q^{n+1}\mathbf{b}\| \leq \|Q\|\|Q^n\mathbf{b}\| \leq \|Q^n\mathbf{b}\| \leq \dots \leq \|\mathbf{b}\|,$$

所以 $\|Q^{n+1}\| \leq 1$ 。这相当于在 (14) 式中取 $K=1$ 。对于 FTCS 格式, Q 是对称阵, 和 2 范数对应的算子范数就是矩阵 Q 的谱半径 $\rho = \max_{1 \leq k \leq M-1} |\lambda_k|$, 其中 λ_k 是矩阵 Q 的特征值。所以差分格式稳定的充分条件是 (Q 是对称阵时, 也是充要条件) 是 $\rho \leq 1$ 。

考虑线性代数中关于求三对角矩阵特征值的定理: 设矩阵 A 为 $M-1$ 阶的三对角矩阵, 即:

$$[A] = \begin{Bmatrix} b & c & & & \\ a & b & c & & \\ & a & b & c & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & a & b \end{Bmatrix}_{(M-1) \times (M-1)},$$

则 A 的特征值为 $\lambda_m = b + 2c \cdot \sqrt{a/c} \cdot \cos\left(\frac{m\pi}{M}\right)$ ($m=1, 2, \dots, M-1$)。

利用该定理, 知 Q 的特征值是:

$$\begin{aligned} \lambda_m &= (1-2\sigma) + 2\sigma \cdot \cos \frac{m\pi}{M} \\ &= 1-2\sigma(1-\cos \frac{m\pi}{M}) \\ &= 1-2\sigma \cdot 2\sin^2 \frac{m\pi}{2M} \\ &= 1-4\sigma \cdot \sin^2 \frac{m\pi}{2M} \end{aligned}.$$

$\rho \leq 1$ 要求对于任意 $1 \leq m \leq M-1$, 有 $|\lambda_m| \leq 1$ 。所以

$$\left| 1 - 4\sigma \cdot \sin^2 \frac{m\pi}{2M} \right| \leq 1, \quad ,$$

解之得

$$0 \leq \sigma \leq \frac{1}{2}, \quad \text{或} \quad 0 \leq \frac{\gamma \Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}。$$

这就是 FTCS 格式的稳定性条件。

矩阵方法虽然是一种通用的稳定性分析方法，但是，由于矩阵的算子范数的计算非常复杂，所以难于应用。

二、Von Neumann 稳定性理论

Von Neumann 稳定性理论是分析常系数差分方程初值问题稳定性的通用方法。这个方法简单、实用，是分析差分格式稳定性的重要工具。

1. 常系数差分格式

把求解域 $x \in [0, L]$ 划分为 M 等分，网格间距为 L/M 。求解域内有 $M+1$ 个网格点， $x_j = j\Delta x$ ($j=0, 1, \dots, M$)。为了消除边界条件的影响，我们假定解满足周期性条件

$$u_j^n = u_{j+\alpha M}^n, \quad (19)$$

其中 α 为整数。显然 $u_0^n = u_M^n$ 。差分方程的解向量为

$$\mathbf{u}^n = \{u_0^n, u_1^n, \dots, u_{M-1}^n\}^T$$

设差分格式 $\mathbf{u}^{n+1} - Q\mathbf{u}^n = 0$ 中的任意分量可以写为

$$u_j^{n+1} = Q_j u_j^n = \sum_s c_s u_{j+s}^n, \quad (20)$$

即

$$u_j^{n+1} = Q_j u_j^n = \left(\sum_s c_s E_x^s \right) u_j^n, \quad (21)$$

所以

$$Q_j = \sum_s c_s E_x^s. \quad (22)$$

在求解域的边界，周期性边界条件要求：

$$\begin{aligned} E_x^{-s} u_0^n &= u_{M-s}^n \quad (s \geq 0) \\ E_x^s u_{M-1}^n &= u_{s-1}^n \quad (s > 0) \end{aligned}$$

2.有限离散 Fourier 级数

定义在有限区间上的绝对可积的周期性函数可以展开为 Fourier 级数。Fourier 级数有许多优良的特性，利用它可以使某些问题的分析变得简单。对于离散网格点上的数值解，我们能否也把他们展开为 Fourier 级数呢？回答是肯定的。这种 Fourier 级数称为有限的离散 Fourier 级数。

Fourier 级数的本质是把函数表示为一系列简谐（正弦和余弦）波的叠加。考虑一个典型的正弦波

$$y = \sin \frac{2\pi x}{\lambda} ,$$

其中 λ 称为波长 ($\sin \frac{2\pi x}{\lambda} = \sin \frac{2\pi(x + \alpha\lambda)}{\lambda}$, α 为整数)。上面的正弦波也可以写为

$$y = \sin k_m x ,$$

$k_m = \frac{2\pi}{\lambda}$ 称为波数。在 $x \in [0, L]$ 区间内，可以表示的正弦波的最大波长为

$$\lambda_{\max} = L = M \Delta x ,$$

最小波长为

$$\lambda_{\min} = 2\Delta x。$$

所以，在离散的网格点上，所能表示的正弦波的波长和相应的波数为：

$$\lambda = 2\Delta x, 4\Delta x, \dots, M\Delta x$$

$$k_m = \frac{2\pi}{L} \frac{M}{2}, \frac{2\pi}{L} \frac{M}{4}, \dots, \frac{2\pi}{L} \frac{M}{M}。$$

为了讨论方便，我们假定 M 为偶数。可以看出：波长越长，波数越小。我们可以把波数写成一般形式

$$k_m = \frac{2\pi}{L} m, m = 1, 2, \dots, M/2。$$

因此，在 $x \in [0, L]$ 上的离散解可以表示为 $M/2$ 个波数为

$k_m = \frac{2\pi}{L} m, m = 1, 2, \dots, M/2$ 的简谐波的和。这就是所谓有限的离散 Fourier 级数。

为了使用方便，我们常把离散 Fourier 级数写成复数的形式：

$$u(x_j) = \sum_{m=-M/2}^{M/2} A_m e^{ik_m x_j}。 \quad (23a)$$

另外，如果 u 与时间相关，则

$$u_j^n = \sum_{m=-M/2}^{M/2} A_m^n e^{ik_m x_j}。 \quad (23b)$$

其中, A_m (A_m^n) 称为波数 k_m 下的幅值, $w_j^m = e^{ik_m x_j}$ 称为基函数, 简称基。上面的公式中 m 的取值范围是 $m = -M/2, \dots, M/2$ 。为什么要在 (23) 式中包含 $m = -M/2, \dots, 0$ 呢? 首先当然是展开式完备性的需要 (见下面的性质 (1)); 另外, 从直观上我们可以这样理解: (23) 左侧是实数, 而右侧是复数。当 $m = \beta$ 和 $m = -\beta$ 时, $e^{ik_\beta x_j}$ 和 $e^{ik_{-\beta} x_j}$ 互为共轭复数, 可以证明此时 A_β 和 $A_{-\beta}$ 也互为共轭复数 (见下面的 (25) 式), 因此右端求和后为实数。

下面给出有限的离散 Fourier 级数的几个重要性质:

1) 基的完备正交性: $m = -M/2, \dots, M/2$ 时, $\mathbf{w}^m = (w_0^m, w_1^m, \dots, w_{M-1}^m)^T$ (其中 $w_j^m = e^{ik_m x_j}$) 在内积

$$\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = \frac{1}{M} \sum_{j=0}^{M-1} u_j \bar{v}_j \quad (\bar{v}_j \text{ 为 } v_j \text{ 的共轭复数})$$

特别的

$$\langle \mathbf{w}^\alpha, \mathbf{w}^\beta \rangle = \frac{1}{M} \sum_{j=0}^{M-1} w_j^\alpha w_j^{-\beta}$$

下构成一组完备的正交基。即

$$\langle \mathbf{w}^\alpha, \mathbf{w}^\beta \rangle = \begin{cases} 1 & \alpha = \beta \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (24)$$

这个性质说明, 定义在网格点上, 满足周期性条件的任意函数都可以写成 (23) 的形式, 且

$$\begin{aligned} A_m &= \langle \mathbf{u}, \mathbf{w}^m \rangle \\ A_m^n &= \langle \mathbf{u}^n, \mathbf{w}^m \rangle \end{aligned} \quad (25)$$

2) 基的移位运算:

$$\begin{aligned} E_x w_j^m &= e^{ik_m \Delta x} w_j^m, \\ E_x^{-1} w_j^m &= e^{-ik_m \Delta x} w_j^m \end{aligned}$$

一般的

$$E_x^\alpha w_j^m = e^{ik_m \alpha \Delta x} w_j^m.$$

3) Parseval 恒等式: 定义范数 $\|\mathbf{u}\| = \langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle$, 如果 $u_j^n = \sum_{m=-M/2}^{M/2} A_m^n e^{ik_m x_j}$, 则

$$\|\mathbf{u}^n\|^2 = \sum_m (|A_m^n|)^2. \quad (26)$$

(26) 式称为 Parseval 恒等式。
这几个性质请读者自行证明。

3. Von Neumann 方法

有了上面的基础，就可以用有限的离散 Fourier 级数分析差分格式的稳定性。
对 (21) 式两侧进行离散 Fourier 展开，有

$$\begin{aligned} \sum_{m=-M/2}^{M/2} A_m^{n+1} e^{ik_m x_j} &= \sum_s c_s E_x^s \left(\sum_{m=-M/2}^{M/2} A_m^n e^{ik_m x_j} \right) \\ &= \sum_s c_s \sum_{m=-M/2}^{M/2} A_m^n e^{ik_m x_j} e^{ik_m s \Delta x} \quad (27) \\ &= \sum_{m=-M/2}^{M/2} A_m^n \left(\sum_s c_s e^{ik_m s \Delta x} \right) e^{ik_m x_j} \end{aligned}$$

两边取范数，有

$$\|\mathbf{u}^{n+1}\|^2 = \sum_m (|A_m^{n+1}|^2) = \sum_m (|A_m^n|^2 \left| \sum_s c_s e^{ik_m s \Delta x} \right|^2)$$

我们发现，当 $\forall m, |G_m| = \left| \sum_s c_s e^{ik_m s \Delta x} \right| \leq 1$ 时，

$$\|\mathbf{u}^{n+1}\|^2 = \sum_m (|A_m^{n+1}|^2) = \sum_m (|A_m^n|^2 \left| \sum_s c_s e^{ik_m s \Delta x} \right|^2) \leq \sum_m (|A_m^n|^2) = \|\mathbf{u}^n\|^2,$$

即

$$\|\mathbf{u}^{n+1}\| \leq \|\mathbf{u}^n\| \leq \|\mathbf{u}^{n-1}\| \leq \dots \leq \|\mathbf{u}^0\|。$$

这相当于稳定性的定义中取 $K=1$ 。所以，当 $\forall m, |G_m| = \left| \sum_s c_s e^{ik_m s \Delta x} \right| \leq 1$ 时，差分格式是稳定的。这就是所谓 Von Neumann 稳定性条件。

4. 简化的 Von Neumann 方法

我们还可以从另一个角度研究差分格式的稳定性。由 (27) 式，利用基的完备正交性，有

$$\forall m, A_m^{n+1} = A_m^n \left(\sum_s c_s e^{ik_m s \Delta x} \right) \quad (28)$$

所以 $G_m = \sum c_s e^{ik_m s \Delta x} = \frac{A_m^{n+1}}{A_m^n}$ 。我们以后称 G_m 为放大因子。显然， $|G_m|$ 代表了展开

式中 n 时刻和 $n+1$ 时刻第 m 个波的幅值的比值。 $\forall m, |G_m| \leq 1$ 意味着

$\forall m, |A_m^{n+1}| \leq |A_m^n|$ ，从而

$$\|\mathbf{u}^{n+1}\| = \sqrt{\sum_m (|A_m^{n+1}|^2)} \leq \sqrt{\sum_m (|A_m^n|^2)} = \|\mathbf{u}^n\| ,$$

即格式是稳定的。

上面的分析说明了，由于基的完备正交性，各个波之间是独立的。所以我们只需考虑其中第 m 个波的作用。这样，我们可以把离散 Fourier 级数简写为：

$$u_j^n = A_m^n e^{ik_m x_j} \quad (29)$$

把 (29) 式代入 (20) 式，有

$$A_m^{n+1} e^{ik_m x_j} = \sum c_s A_m^n e^{ik_m x_{j+s}} ,$$

即

$$G_m = \frac{A_m^{n+1}}{A_m^n} = \sum c_s e^{ik_m s \Delta x} .$$

所以，我们同样得到了放大因子 G_m ，且

$$|G_m| = \left| \frac{A_m^{n+1}}{A_m^n} \right| = \left| \sum c_s e^{ik_m s \Delta x} \right| .$$

如果， $\forall m, |G_m| \leq 1$ ，则差分格式是稳定的。下面我们用这种方法分析格式的稳定性。

可以看出，当放大因子的模小于 1 时，数值解的振幅随时间减小，我们称差分格式具有（正）耗散性。显然，具有耗散性的格式是稳定的。

5. 初边值问题

上面，我们研究了初值问题的稳定性分析方法。初边值问题的稳定性分析需要较多的数学知识，这里不再介绍。相关的方法和理论（如 GKS 理论）可以参考其他书籍。我们只强调一点，Von Neumann 条件是初边值问题稳定的必要条件。所以，如果我们不考虑边界条件的影响，也可以用 Von Neumann 方法对初边值问题的稳定性进行初步分析。

三、 稳定性分析实例

1. 抛物型方程 $\frac{\partial u}{\partial t} = \gamma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 的 FTCS 格式

差分格式可以写为：

$$u_k^{n+1} = \sigma u_{k+1}^n + (1-2\sigma)u_k^n + \sigma u_{k-1}^n ,$$

其中, $\sigma = \frac{\gamma \Delta t}{\Delta x^2}$ 。令 $u_k^n = A_m^n e^{ik_m x_k}$, 代入上式有：

$$\begin{aligned} A_m^{n+1} e^{ik_m x_k} &= \sigma A_m^n e^{ik_m x_{k+1}} + (1-2\sigma)A_m^n e^{ik_m x_k} + \sigma A_m^n e^{ik_m x_{k-1}} \\ \Rightarrow |G_m| &= \left| \frac{A_m^{n+1}}{A_m^n} \right| = \left| \sigma e^{ik_m \Delta x} + (1-2\sigma) + \sigma A_m^n e^{-ik_m \Delta x} \right| \\ &= \left| (1-2\sigma) + 2\sigma \cdot \cos k_m \Delta x \right| \\ &= \left| 1 - 4\sigma \cdot \sin^2 \frac{k_m \Delta x}{2} \right| \leq 1 \\ \Leftrightarrow \quad 0 &\leq \sigma \leq \frac{1}{2} \end{aligned}$$

与矩阵方法得到的结论相同。

2. 双曲型方程 $\frac{\partial u}{\partial x} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0$ 的 Lax-Wendroff 格式

差分格式为：

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

令 $c = \frac{a \Delta t}{\Delta x}$, 则

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

容易得到

$$G_m = 1 - c^2 (1 - \cos \beta) - ic \cdot \sin \beta ,$$

其中 $\beta = k_m \Delta x$ 。因此

$$\begin{aligned} |G_m| &= \sqrt{[1 - c^2(1 - \cos \beta)]^2 + c^2 \sin^2 \beta} \\ &= \sqrt{1 + (1 - \cos \beta)^2 c^2 (c^2 - 1)} \end{aligned}。$$

由 $|G_m| \leq 1$, 即

$$\sqrt{1 + (1 - \cos \beta)^2 c^2 (c^2 - 1)} \leq 1 ,$$

得到

$$|c| \leq 1 ,$$

即 Von-Neumann 稳定性条件是 $|c| \leq 1$ 。

3. 对流扩散方程 $\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = v \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 的 FTCS 格式

差分格式为：

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta t} = v \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta t^2}。$$

容易得到

$$\begin{aligned} G_m &= 1 + 2\sigma(\cos k\Delta x - 1) - ic \sin k\Delta x \\ &= 1 + 2\sigma(\cos \beta - 1) - ic \sin \beta \end{aligned} ,$$

其中 $\sigma = \frac{v\Delta t}{\Delta x^2}$, $c = \frac{a\Delta t}{\Delta x}$, $\beta = k_m \Delta x$ 。格式稳定要求

$$|G_m|^2 = (1 - 2\sigma)^2 + c^2 + 4\sigma(1 - 2\sigma)\cos \beta + (4\sigma^2 - c^2)\cos^2 \beta \leq 1$$

因为 β 可以任意取值，直接解这个不等式比较困难，我们可以采用另一种方法，

即求出 $|G_m|^2$ 随 β 变化的所有极值点，然后在各个极值点求解关于 σ, c 的不等式。

首先求解

$$\frac{\partial |G_m|^2}{\partial \beta} = -4\sigma(1 - 2\sigma)\sin \beta - 2(4\sigma^2 - c^2)\cos \beta \sin \beta = 0$$

可以得出 $|G_m|^2$ 的极值点为

$$\beta = 0, \pm\pi, \arccos\left(-\frac{2\sigma(1-2\sigma)}{4\sigma^2-c^2}\right)。$$

当 $\beta = 0$ 时, $|G_m|^2 = 1$;

当 $\beta = \pm\pi$, $|G_m|^2 = (1-4\sigma)^2 \leq 1 \Rightarrow 0 \leq \sigma \leq \frac{1}{2}$

当 $\cos \beta = -\frac{2\sigma(1-2\sigma)}{4\sigma^2-c^2}$ 时, 分两种情况考虑: (1) $4\sigma^2 - c^2 \geq 0$ 时, 考虑到 $0 \leq \sigma \leq \frac{1}{2}$, 有 $\cos \beta = -\frac{2\sigma(1-2\sigma)}{4\sigma^2-c^2} \leq 0$ 。所以

$$|G_m|^2 \leq (1-2\sigma)^2 + c^2 + 4\sigma(1-2\sigma) + (4\sigma^2 - c^2) = 1。$$

此时的稳定性条件为 $\frac{|c|}{2} \leq \sigma \leq \frac{1}{2}$ 。(2) $4\sigma^2 - c^2 < 0$ 时, 再分两种情况考虑, (a)

$-\frac{2\sigma(1-2\sigma)}{4\sigma^2-c^2} \geq 1$, 即 $\sigma \geq \frac{c^2}{2}$ 此时 $\beta = \arccos(-\frac{2\sigma(1-2\sigma)}{4\sigma^2-c^2})$ 无定义 (除了 $-\frac{2\sigma(1-2\sigma)}{4\sigma^2-c^2} = 1$), 不

可能是极值点。所以此时的极值点只能是 $\beta = 0, \pi$ 。这些情况我们已经分析过了。

此时稳定的条件是

$$4\sigma^2 - c^2 < 0, -\frac{2\sigma(1-2\sigma)}{4\sigma^2-c^2} \geq 1, 0 \leq \sigma \leq \frac{1}{2},$$

即 $\sigma \leq \frac{1}{2}, \frac{c^2}{2} \leq \sigma \leq \frac{1}{2} \leq \frac{|c|}{2}$ 。(b) $-\frac{2\sigma(1-2\sigma)}{4\sigma^2-c^2} \leq 1$, 即 $\sigma < \frac{c^2}{2}$ 。把 $\cos \beta = -\frac{2\sigma(1-2\sigma)}{4\sigma^2-c^2}$ 代入

$|G_m|^2 = (1-2\sigma)^2 + c^2 + 4\sigma(1-2\sigma)\cos \beta + (4\sigma^2 - c^2)\cos^2 \beta$, 可以证明此时格式恒不稳定。

综上所述, 对流扩散方程的 FTCS 格式稳定的条件是:

$$\frac{|c|}{2} \leq \sigma \leq \frac{1}{2}, \frac{c^2}{2} \leq \sigma \leq \frac{|c|}{2},$$

即

$$\frac{c^2}{2} \leq \sigma \leq \frac{1}{2}。$$

4. 方程组问题的稳定性分析

考虑方程

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - a \frac{\partial w}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial w}{\partial t} - b \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \end{cases}$$

其中 $c_1 = \frac{a\Delta t}{\Delta x}$ $c_2 = \frac{b\Delta t}{\Delta x}$ 。求解该方程组的 Lax-Wendroff 格式为

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= u_j^n + \frac{c_1}{2} (w_{j+1}^n - w_{j-1}^n) + \frac{c_1 c_2}{2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \\ w_j^{n+1} &= w_j^n + \frac{c_2}{2} (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + \frac{c_1 c_2}{2} (w_{j+1}^n - 2w_j^n + w_{j-1}^n) \quad . \end{aligned}$$

$$\text{令, } u_j^{n+1} = A_{um}^{n+1} e^{ik_m x_j} w_j^{n+1} = A_{wm}^{n+1} e^{ik_m x_j}, [A_m]^n = \begin{Bmatrix} A_{um}^n \\ A_{wm}^n \end{Bmatrix},$$

则

$$\begin{aligned} A_{um}^{n+1} &= \left[1 - 2c_1 c_2 \sin^2 \left(\frac{\beta}{2} \right) \right] A_{um}^n + ic_2 \sin \beta A_{wm}^n \\ A_{wm}^{n+1} &= ic_1 \sin \beta A_{um}^n + \left[1 - 2c_1 c_2 \sin^2 \left(\frac{\beta}{2} \right) \right] A_{wm}^n \quad . \end{aligned}$$

写为

$$\begin{aligned} [A_m]^{n+1} &= G [A_m]^n, \\ G &= \begin{Bmatrix} 1 - 2c_1 c_2 \sin^2 \frac{\beta}{2} & ic_2 \sin \beta \\ ic_1 \sin \beta & 1 - 2c_1 c_2 \sin^2 \frac{\beta}{2} \end{Bmatrix} . \end{aligned}$$

稳定条件为： $\|G\| \leq 1$ 即 $\rho(G) \leq 1$ 。求 G 的特征值：

$$\begin{vmatrix} 1 - 2c_1 c_2 \sin^2 \beta - \lambda & ic_2 \sin \beta \\ ic_1 \sin \beta & 1 - 2c_1 c_2 \sin^2 \beta - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$\lambda_{1,2} = \left(1 - 2c_1 c_2 \sin^2 \frac{\beta}{2} \right) \pm i \sqrt{c_1 c_2} \sin \beta$$

$$|\lambda|^2 = \left(1 - 2c_1 c_2 \sin^2 \frac{\beta}{2} \right)^2 + c_1 c_2 \sin^2 \beta$$

$$= 1 - 4c_1 c_2 \left(1 - c_1 c_2 \right) \sin^4 \frac{\beta}{2} .$$

所以， $c_1 c_2 \leq 1$ 时， $|\lambda| \leq 1$ ，格式是稳定的。

5. 非线性问题的局部线性化稳定性分析

考虑粘性 Burgers 方程 $\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 的 FTCS 格式

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + u_j^n \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta t} = \nu \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta t^2}。$$

由于这是一个非线性差分格式，上面的分析不再适用。事实上，非线性问题的稳定性分析没有统一的方法，是一类非常复杂的问题。在实用上，我们可以采用局部线性化的方法，把它转化为线性问题，再进行稳定性分析。当然这种方法是不严格的。在这个例子中，我们把差分格式线化为

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta t} = \nu \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta t^2}，$$

并假定 a 是常数，进行稳定性分析。结果是 $\frac{c^2}{2} \leq \sigma \leq \frac{1}{2}$ （见 3.）最后，在 c, σ 的

定义中，把 a 换成 u_j^n 。

§5 发展方程的差分格式

在本节，我们讨论发展形偏微分方程的构造方法和相容、稳定等性质。

一、双曲型方程

我们讨论双曲型模型方程：线性对流方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (1)$$

的差分格式。我们把格式的构造方法分为以下几类：(1) 基于导数逼近，(2) 基于特征理论，(3) 基于时间方向展开，(4) 基于算子分裂的方法。在讨论格式的构造方法的同时，介绍了一些典型差分格式和著名的 CFL 条件。在此基础上，简单的介绍了边界条件的数值处理。

1. 基于导数逼近的差分格式

直接近似微分方程中的导数，是构造差分格式的最简单的方法。在 (1) 式

中，我们对时间导数可取前差、后差和中心差，空间导数也可取前差、后差和中心差，组合起来我们就可以得到 9 种格式。当然，前面介绍过，我们还可以对偏导数取其他更多类型的差分近似，所以还可以得到更多的不同格式。我们打算一一介绍这些格式，而是只介绍几种典型的情况。

1) Euler 显式格式

时间方向取前差，空间方向取中心差得到的格式为 Euler 显式格式：

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} = 0 \quad (2)$$

我们首先分析它的稳定性，取 $u_j^n = A^n e^{ikx_j}$ （为了书写简单，我们略去了 A, k 的下标 m ），则

$$\begin{aligned} & \frac{A^{n+1} e^{ikx_j} - A^n e^{ikx_j}}{\Delta t} + a \frac{A^n e^{ikx_{j+1}} - A^n e^{ikx_{j-1}}}{2\Delta x} = 0 \\ \Rightarrow A^{n+1} &= A^n (1 - i \frac{a\Delta t}{\Delta x} \sin(k\Delta x)) \\ \Rightarrow |G| &= \left| \frac{A^{n+1}}{A^n} \right| = \sqrt{1 + (\frac{a\Delta t}{\Delta x} \sin(k\Delta x))^2} > 1 \end{aligned}$$

所以格式是无条件不稳定的。无条件不稳定的格式没有应用价值，在计算一定步数后，数值解将迅速增大，很快超过计算机能表示的最大数而导致计算中止。

2) Euler 隐式格式

时间方向取后差，空间方向取中心差得到的格式为 Euler 隐式格式：

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a \frac{u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{2\Delta x} = 0 \quad (3)$$

我们分析它的稳定性，取 $u_j^n = A^n e^{ikx_j}$ （为了书写简单，我们略去了 A, k 的下标 m ），则

$$\begin{aligned} & \frac{A^{n+1} e^{ikx_j} - A^n e^{ikx_j}}{\Delta t} + a \frac{A^{n+1} e^{ikx_{j+1}} - A^{n+1} e^{ikx_{j-1}}}{2\Delta x} = 0 \\ \Rightarrow A^{n+1} (1 + i \frac{a\Delta t}{\Delta x} \sin(k\Delta x)) &= A^n \\ \Rightarrow |G| &= \left| \frac{A^{n+1}}{A^n} \right| = \frac{1}{\sqrt{1 + (\frac{a\Delta t}{\Delta x} \sin(k\Delta x))^2}} \leq 1 \end{aligned}$$

这种格式称为无条件稳定的。可见，隐式格式稳定性较好。对各种隐式格式而言，这个特点具有一般性。无条件稳定的格式可以允许在数值计算中采用较大的时间步长，这对于用时间相关方法求解定常问题时提高收敛速度和计算效率是有力的。对于非定常问题，时间步长的选取还应考虑对计算结果精度的要求。显然，格式的截断误差是：

$$L.T.E. = O((\Delta x)^2 + (\Delta t)).$$

即格式是相容的，时间方向为一阶精度，空间方向为二阶精度。

3) 蛙跳 (Leap - Frog) 格式

时间方向和空间方向都用中心差分，相应的格式叫蛙跳格式：

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t} + a \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} = 0. \quad (4)$$

蛙跳格式是一个时间方向三层的格式。在计算中，需要知道 $n=0,1$ 两个时间步的初值。如果 $n=1$ 时的初值未知，我们就需要用其他两层格式算出 $n=1$ 时的数值解。下面我们分析格式的稳定性。令 $u_j^n = A^n e^{ikx_j}$ ，代入 (4) 式，有

$$\begin{aligned} & \frac{A^{n+1} e^{ikx_j} - A^{n-1} e^{ikx_j}}{2\Delta t} + a \frac{A^n e^{ikx_{j+1}} - A^n e^{ikx_{j-1}}}{2\Delta x} = 0 \\ \Rightarrow & \frac{A^{n+1}}{A^n} - \frac{A^{n-1}}{A^n} + \frac{a\Delta t}{\Delta x} 2i \sin(k\Delta x) = 0 \end{aligned}$$

可以认为 $G = \frac{A^{n+1}}{A^n} = \frac{A^n}{A^{n-1}}$ ，所以

$$\begin{aligned} & G^2 + \frac{a\Delta t}{\Delta x} 2i \sin(k\Delta x) G - 1 = 0 \\ \Leftrightarrow & G = -\frac{a\Delta t}{\Delta x} i \sin(k\Delta x) \pm \sqrt{1 - \left(\frac{a\Delta t}{\Delta x} \sin(k\Delta x)\right)^2} \\ \Leftrightarrow & G = \begin{cases} 1 & \text{if } 1 - \left(\frac{a\Delta t}{\Delta x} \sin(k\Delta x)\right)^2 \geq 0 \\ \left(\sqrt{\left(\frac{a\Delta t}{\Delta x} \sin(k\Delta x)\right)^2 - 1} - \frac{a\Delta t}{\Delta x} \sin(k\Delta x)\right) & \text{otherwise} \end{cases} \end{aligned}$$

由此可知稳定的条件是 $|c| = \frac{|a|\Delta t}{\Delta x} \leq 1$ 。其中 $c = \frac{a\Delta t}{\Delta x}$ 为无量纲数，称为 CFL 数。

蛙跳格式时间和空间方向均为二阶精度。

蛙跳格式在满足稳定性条件时，放大因子的模为 1。我们称该格式具有零耗散，具有零耗散的格式被称为中性稳定的。

4) 一阶迎风 and 背风格式

时间方向采用前差，空间方向采用前差或后差，我们就可以得到以下两个格式：

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{\Delta x} = 0 \quad (5a)$$

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} = 0 \quad (5b)$$

通过分析格式的稳定性，我们知道：

(a) $a > 0$ 时，(5a) 无条件不稳定； $a < 0$ 时，(5a) 的稳定条件是 $|c| = \frac{|a|\Delta t}{\Delta x} \leq 1$ 。

(b) $a > 0$ 时，(5b) 的稳定条件是 $|c| = \frac{|a|\Delta t}{\Delta x} \leq 1$ ； $a < 0$ 时，(5b) 无条件不稳定。

当 $a < 0$ 的 (5a) 和 $a > 0$ 时的 (5b) 称为迎风格式 (Upwind Scheme)；当 $a < 0$ 的 (5b) 和 $a > 0$ 时的 (5a) 称为背风格式 (Downwind Scheme)。显然，背风格式是不稳定的。迎风格式和背风格的物理意义是什么？为什么背风格式不稳定呢？考虑 $a > 0$ 的情况。此时由线性对流方程的解析解 $u(x, t) = u_0(x - at)$ 知，波动是从左向右传播的。 u_j^{n+1} 点受 u_{j-1}^n 的影响，但是不受 u_{j+1}^n 的影响。(5b) 正确的体现了这种影响，而 (5a) 则违背了波的传播特性，从而造成了它的不稳定。由于 (5b) 中的空间差分的模板点为当前点 u_j^n 和迎风方向的一点 u_{j-1}^n ，所以 (5b) 称为迎风格式。 $a < 0$ 时的情况正好相反。

2. 基于特征理论的差分格式

特征性质是双曲型方程的重要特点。在构造差分格式是考虑到微分方程的数学物理特点，有助于得到较好的差分格式。

方程 $\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0$ 的特征线为 $x - at = c$ ，沿特征线 $u = \text{const}$ 。考虑 $a > 0$ 的情

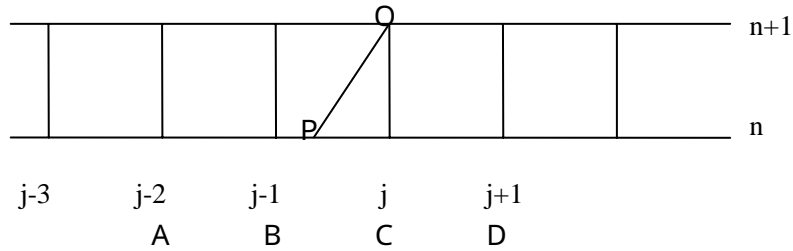


图 1

形，此时，过 O (即 u_j^{n+1}) 点的特征线与 $t = n\Delta t$ 的交点 P 在 x_j 的左侧。参考图 1, 我们知道：

$$u_j^{n+1} = u(x_j, (n+1)\Delta t) = u_O = u_P = u(x_j - a\Delta t, n\Delta t)。 \quad (6)$$

由于 P 点一般不在网格点上，P 点的值必须由 A、B、C 等各点通过插值来获得。

i) 采用 B，C 两点线性插值，得

$$u_P = u_B + \frac{u_C - u_B}{\Delta x} (\Delta x - a\Delta t)$$

即

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

记 $c = a \frac{\Delta t}{\Delta x}$, 上式为 :

$$u_j^{n+1} = (1-c)u_j^n + cu_{j-1}^n ,$$

也可以写为 :

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} = 0. (7)$$

这就是所谓迎风格式。迎风格式的截断误差为 $L.T.E. = O((\Delta x) + (\Delta t))$, 稳定条件是 $0 \leq c \leq 1$ ($a > 0$ 时)。

ii) 采用 B,D 两点进行线性插值,有

$$u_P = u_B + \frac{u_D - u_B}{2\Delta x} (\Delta x - a\Delta t) ,$$

即

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

或

$$\frac{u_j^{n+1} - \frac{1}{2} (u_{j-1}^n + u_{j+1}^n)}{\Delta t} + a \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} = 0. (8)$$

该格式称为 Lax 格式 (或 Lax - Friedrichs 格式)。Lax 格式的截断误差为 $L.T.E. = O((\Delta x) + (\Delta t))$, 稳定条件是 $|c| \leq 1$ 。

iii) 采用 A,B,C.三点进行二次插值

设二次曲线 $u(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$, 满足

$$u(x_A) = u_A, u(x_B) = u_B, u(x_C) = u_C.$$

由此, 可以定出系数 a_0, a_1, a_2 。把 P 点坐标代入 $u(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$, 可得

$$u_P = u_B + \frac{u_C - u_A}{2\Delta x} (\Delta x - a\Delta t) + \frac{u_A + u_C - 2u_B}{2\Delta x^2} (\Delta x - a\Delta t)^2.$$

整理得

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{c}{2}(3u_j^n - 4u_{j-1}^n + u_{j-2}^n) + \frac{c^2}{2}(u_{j-2}^n - 2u_{j-1}^n + u_j^n) \quad (9)$$

$$\Leftrightarrow \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a \frac{(3u_j^n - 4u_{j-1}^n + u_{j-2}^n)}{2\Delta x} = \frac{a^2 \Delta t}{2\Delta x^2} (u_{j-2}^n - 2u_{j-1}^n + u_j^n)。$$

该格式称为 Warming - Beam 格式。Warming - Beam 格式的截断误差为 $L.T.E. = O((\Delta x)^2 + (\Delta t)^2)$ (时间和空间方向均为二阶精度), 稳定条件是 $0 \leq c \leq 2$ ($a > 0$ 时)。

iv) 采用 B, C, D 三点进行二次插值

设二次曲线 $u(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$, 满足

$$u(x_B) = u_B, u(x_C) = u_C, u(x_D) = u_D。$$

由此, 可以定出系数 a_0, a_1, a_2 。把 P 点坐标代入 $u(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$, 可得

$$u_P = u_B + \frac{u_D - u_B}{2\Delta x}(-a\Delta t) + \frac{u_B + u_D - 2u_C}{2\Delta x^2}(-a\Delta t)^2。$$

整理得

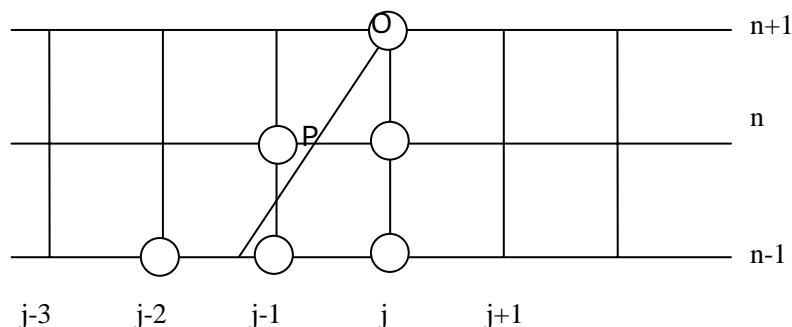
$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{c}{2}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + \frac{c^2}{2}(u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n) \quad (10)$$

$$\Leftrightarrow \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a \frac{(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n)}{2\Delta x} = \frac{a^2 \Delta t}{2\Delta x^2} (u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n)。$$

该格式称为 Lax - Wendroff 格式。Lax - Wendroff 格式的截断误差为 $L.T.E. = O((\Delta x)^2 + (\Delta t)^2)$ (时间和空间方向均为二阶精度), 稳定条件是 $|c| \leq 1$ 。

通过上面几个格式的构造, 我们可以看出: (1) 当 $a > 0$ 时, 用 u_j^n 及其左侧的点进行插值时, 得到的是迎风型格式 (Warming - Beam 格式可以看作二阶迎风格式), 其稳定性条件与 a 的正负有关; (2) 当用 u_j^n 及与之对称的点进行插值时, 得到的是中心型格式, 此时, 其稳定性条件与 a 的正负无关; (3) 当差分格式稳定时, P 点必然在插值点中间, 即由插值点内插出 P 点的值时, 差分格式才可能是稳定的。我们可以验证, 当 P 点的值由插值点外推得到时, 格式必然不稳定。如 $a > 0$ 时, 可以用 C, D 外推出 P 点的值, 此时得到的是所谓顺风格式, 该格式无条件不稳定。这种现象有一般意义, 称为 Courant - Friedrichs - Lewy (CFL) 条件:

定理: 双曲型方程的差分格式稳定 (在 Lax 等价性定理满足时亦即收敛) 的必要条件是差分格式的依赖域包含微分方程的依赖域。



我们已经介绍过微分方程的依赖域。对于线性对流方程， O （即 u_j^{n+1} ）点的依赖域即为 $t = n\Delta t$ 时刻的 P 点。差分格式中， O （即 u_j^{n+1} ）点的依赖域为 $t = (n+1)\Delta t$ 时刻以前，计算 u_j^{n+1} 所用到的所有模板点的集合。图 2 所示的是迎风格式的依赖域。对于迎风格式而言，当 $0 \leq c \leq 1$ 时，差分格式的依赖域包含微分方程的依赖域；对于 Warming - Beam 格式而言，当 $0 \leq c \leq 2$ 时，差分格式的依赖域包含微分方程的依赖域；而顺风格式，差分格式的依赖域不包含微分方程的依赖域。注意、CFL 条件只是稳定的必要条件，比如，Euler 显式格式，当 $|c| \leq 1$ 时，差分格式的依赖域包含微分方程的依赖域，但仍然是不稳定的。

3. 基于时间方向展开的差分格式

把 u_j^{n+1} 在 u_j^n 作 Taylor 展开，得

$$u_j^{n+1} = u_j^n + u_t)_j^n \Delta t + \frac{1}{2!} u_{tt})_j^n (\Delta t)^2 + O((\Delta t)^3)$$

注意到：

$$\begin{aligned} u_t &= -au_x \\ u_{tt} &= (u_t)_t = (-au_x)_t = -a(u_t)_x = a^2 u_{xx} \end{aligned}$$

所以

$$u_j^{n+1} = u_j^n - a(u_x)_j^n \Delta t + \frac{1}{2!} a^2 (u_{xx})_j^n (\Delta t)^2 + O((\Delta t)^3)。 \quad (11)$$

上述推导过程称为 Lax - Wendroff 过程或者 Cauchy - Kowalewski 过程，是推导差分格式的常用技巧。我们希望，构造时间和空间方向均为二阶精度的格式。由 (11) 式，时间方向显然有二阶精度。为了使空间方向具有二阶精度，(11) 式中 u_x 的离散至少要有二阶精度， u_{xx} 项的离散至少要有一阶精度。

当 u_x ， u_{xx} 均用中心差分离散时，有

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= u_j^n - \frac{c}{2} (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + \frac{c^2}{2} (u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n) \\ &\Leftrightarrow \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a \frac{(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n)}{2\Delta x} = \frac{a^2 \Delta t}{2\Delta x^2} (u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n)。 \end{aligned}$$

这就是 Lax - Wendroff 格式。当 u_x 用二阶迎风差分离散， u_{xx} 也用迎风离散时，如 $a > 0$ ，则

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{c}{2}(3u_j^n - 4u_{j-1}^n + u_{j-2}^n) + \frac{c^2}{2}(u_{j-2}^n - 2u_{j-1}^n + u_j^n) \quad (12a)$$

$$\Rightarrow \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a \frac{(3u_j^n - 4u_{j-1}^n + u_{j-2}^n)}{2\Delta x} = \frac{a^2 \Delta t}{2\Delta x^2} (u_{j-2}^n - 2u_{j-1}^n + u_j^n)。$$

如 $a < 0$, 则

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{c}{2}(3u_j^n - 4u_{j+1}^n + u_{j+2}^n) + \frac{c^2}{2}(u_j^n - 2u_{j+1}^n + u_{j+2}^n) \quad (12b)$$

$$\Leftrightarrow \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a \frac{(-3u_j^n + 4u_{j+1}^n - u_{j+2}^n)}{2\Delta x} = \frac{a^2 \Delta t}{2\Delta x^2} (u_j^n - 2u_{j+1}^n + u_{j+2}^n)。$$

(12a) 和 (12b) 即为 Warming - Beam 格式。

基于时间展开的方法也可以用来构造隐式格式。把 u_j^{n+1} 在 u_j^n 作 Taylor 展开 , 得

$$u_j^{n+1} = u_j^n + u_t)_j^n \Delta t + \frac{1}{2!} u_{tt})_j^n (\Delta t)^2 + O((\Delta t)^3) 。$$

注意到 :

$$u_t)_j^{n+1} = u_t)_j^n + u_{tt})_j^n \Delta t + \frac{1}{2} u_{ttt})_j^n (\Delta t)^2 + O((\Delta t)^3) ,$$

可得

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{1}{2} u_t)_j^n \Delta t + \frac{1}{2} u_t)_j^{n+1} \Delta t + O((\Delta t)^3) ,$$

因此

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{a \Delta t}{2} [u_x)_j^n + u_x)_j^{n+1}] + O((\Delta t)^3)。$$

当 $u_x)_j^n, u_x)_j^{n+1}$ 用二阶精度方法离散时 , 我们可以得到时间、空间均为二阶精度的隐式格式 , 称为 Crank - Nicolson 格式。

4. 基于算子分裂方法的格式

1) MacCormack 格式

Lax - Wendroff 格式可以写为算子形式 :

$$u_j^{n+1} = [1 - \frac{c}{2}(\Delta_x + \nabla_x) + \frac{c^2}{2}(\Delta_x \nabla_x)] u_j^n ,$$

上式可以进一步化为

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= [1 - \frac{c}{2}(\Delta_x + \nabla_x) + \frac{c^2}{2}(\Delta_x \nabla_x)] u_j^n \\ &= [\frac{1}{2} + \frac{1}{2}(1 - c \nabla_x) - \frac{c}{2} \Delta_x (1 - c \nabla_x)] u_j^n \\ &= \frac{1}{2} u_j^n + \frac{1}{2} (1 - c \nabla_x) (1 - c \Delta_x) u_j^n。 \end{aligned}$$

令

$$u_j^{\overline{n+1}} = (1 - c\Delta_x)u_j^n ,$$

则差分格式可以写为

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2}u_j^n + \frac{1}{2}(1 - c\nabla_x)u_j^{\overline{n+1}}。$$

通过上述步骤，我们得到了一个新格式，称为 MacCormack 格式。MacCormack 格式是一个两步格式，第一步为预测步：

$$u_j^{\overline{n+1}} = u_j^n - c\Delta_x u_j^n , \quad (13a)$$

第二步称为校正步：

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2}[u_j^n + u_j^{\overline{n+1}} - c\nabla_x u_j^{\overline{n+1}}]。 \quad (13b)$$

MacCormack 格式的另一种形式为：

预测步：
$$u_j^{\overline{n+1}} = u_j^n - c\nabla_x u_j^n$$

校正步：
$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2}[u_j^n + u_j^{\overline{n+1}} - c\Delta_x u_j^{\overline{n+1}}]。$$

显然，对于线性对流方程，MacCormack 格式和 Lax - Wendroff 格式是等价的。但是，对于非线性问题，如流体力学方程组，二者不等价。相比之下，MacCormack 格式更为简单有效。

2) 两步的 Warming - Beam 格式

我们只考虑 $a > 0$ 的情况。和推导 MacCormack 格式的方法类似。我们对 Warming - Beam 格式进行如下变换

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= [1 - c\left(\nabla_x + \frac{\nabla_x^2}{2}\right) + \frac{c^2}{2}\nabla_x^2]u_j^n \\ &= [\frac{1}{2} + \frac{1}{2}(1 - c\nabla_x) - \frac{1}{2}c\nabla_x(1 - c\nabla_x) - \frac{1}{2}\nabla_x^2]u_j^n \\ &= [\frac{1}{2} + \frac{1}{2}(1 - c\nabla_x)(1 - c\nabla_x) - \frac{1}{2}c\nabla_x^2]u_j^n, \end{aligned}$$

所以，Warming - Beam 格式可以写为两步形式：

预测步：
$$u_j^{\overline{n+1}} = u_j^n - c\nabla_x u_j^n , \quad (14a)$$

校正步：
$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2}[u_j^n + u_j^{\overline{n+1}} - c\nabla_x u_j^{\overline{n+1}} - c\nabla_x^2 u_j^n]。 \quad (14b)$$

注意到，两步的 Warming - Beam 格式的预测步相当于一阶迎风格式。

另一种可能的算子分裂方法：

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= [1 - c\left(\nabla_x + \frac{\nabla_x^2}{2}\right) + \frac{c^2}{2}\nabla_x^2]u_j^n , \\ &= [1 - \frac{1}{2}c(\nabla_x + \nabla_x^2) - \frac{1}{2}c\nabla_x(1 - c\nabla_x)] \end{aligned}$$

根据上式，两步格式的预测步为：

$$u_j^{\overline{n+1}} = u_j^n - c\nabla_x u_j^n , \quad (15a)$$

校正步为：

$$u_j^{n+1} = u_j^{n+1} - \frac{1}{2}c(\nabla_x + \nabla_x^2)u_j^{n+1} - \frac{1}{2}c\nabla_x \overline{u_j^{n+1}}。 \quad (15b)$$

这个格式也称为两步 Warming - Beam 格式。

3) Runge - Kutta 方法，半离散格式

把 u_j^{n+1} 作 Taylor 展开，

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= u_j^n + u_t^n \Delta t + \frac{1}{2!} u_{tt}^n (\Delta t)^2 + \frac{1}{3!} u_{ttt}^n (\Delta t)^3 + \frac{1}{4!} u_{tttt}^n (\Delta t)^4 + O((\Delta t)^5) \\ &= (1 + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} (1 + \frac{1}{2} \Delta t \frac{\partial}{\partial t} (1 + \frac{1}{3} \Delta t \frac{\partial}{\partial t} (1 + \frac{1}{4} \Delta t \frac{\partial}{\partial t})))) u_j^n。 \end{aligned}$$

因此，上式可以写成下面的分步形式：

$$\begin{aligned} u_j^{(1)} &= u_j^n + \frac{\Delta t}{4} \frac{\partial}{\partial t} u_j^n \\ u_j^{(2)} &= u_j^n + \frac{\Delta t}{3} \frac{\partial}{\partial t} u_j^{(1)} \\ u_j^{(3)} &= u_j^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} u_j^{(2)} \\ u_j^{n+1} &= u_j^n + \frac{\Delta t}{1} \frac{\partial}{\partial t} u_j^{(3)}。 \end{aligned} \quad (16)$$

对于线性对流方程 $\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0$ ，容易验证：

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_j^n}{\partial t} &= -a \frac{\partial u_j^n}{\partial x}, \\ \frac{\partial u_j^{(k)}}{\partial t} &= -a \frac{\partial u_j^{(k)}}{\partial x} \quad (k=1,2,3) \end{aligned} \quad (17)$$

所以，(16) 式也可写为：

$$\begin{aligned} u_j^{(1)} &= u_j^n - \frac{\Delta t}{4} a \frac{\partial}{\partial x} u_j^n \\ u_j^{(2)} &= u_j^n - \frac{\Delta t}{3} a \frac{\partial}{\partial x} u_j^{(1)} \\ u_j^{(3)} &= u_j^n - \frac{\Delta t}{2} a \frac{\partial}{\partial x} u_j^{(2)} \\ u_j^{n+1} &= u_j^n - \frac{\Delta t}{1} a \frac{\partial}{\partial x} u_j^{(3)}。 \end{aligned} \quad (18)$$

(18) 中涉及的空间导数可以用前面介绍的任何方法离散。基于上述过程的格式称为 Runge - Kutta 方法。这里介绍的是所谓四级 Runge - Kutta 方法，显然，我们还可以构造低于四级和高于四级的 Runge - Kutta 方法。对于线性偏微分方程，我们可以证明，无论空间方向如何离散，四级的 Runge - Kutta 方法时间方向为

四阶精度（对于非线性偏微分方程，类似于（17）式的关系不是精确成立的，格式在时间方向一般只有二阶精度）。

由（16）式，我们可以看出 Runge - Kutta 方法的一个重要特点：即时间离散和空间离散是相互独立的。事实上，（16）式可用来求解任何形如

$$\frac{\partial u}{\partial t} + P(u, u_x, \dots) = 0 \quad (19)$$

的方程。如果我们已经对（19）式的空间导数进行离散

$$\frac{\partial u}{\partial t} + P_{\Delta}(u, u_x, \dots) = 0, \quad (20)$$

根据

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_j^n}{\partial t} &= -P_j^n \\ \frac{\partial u_j^{(k)}}{\partial t} &= -P_j^{(k)} \quad (k=1, 2, 3, \text{对于非线性问题近似成立}) \end{aligned} \quad (21)$$

根据（20），（21），有

$$\begin{aligned} u_j^{(1)} &= u_j^n - \frac{\Delta t}{4} P_{\Delta j}^n \\ u_j^{(2)} &= u_j^{(1)} - \frac{\Delta t}{3} P_{\Delta j}^{(1)} \\ u_j^{(3)} &= u_j^{(2)} - \frac{\Delta t}{2} P_{\Delta j}^{(2)} \\ u_j^{n+1} &= u_j^{(3)} - \frac{\Delta t}{1} P_{\Delta j}^{(3)}. \end{aligned} \quad (22)$$

这个特点可以是我們有可能把注意力集中于（19）式中空间导数的离散（空间导数的离散在差分格式的构造中往往是更复杂和重要的），而时间方向暂时保留连续的形式，这样，我们就得到了形如（20）式的差分格式，称为半离散格式。在空间导数的离散确定后，就可以得到形如（22）式的全离散格式。

下面，我们具体讨论线性对流方程 $\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0$ 的半离散格式。Jameson 提出 $\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0$ 的一种半离散格式为

$$\frac{\partial u_j}{\partial t} + P_{\Delta j} = 0 \quad (23)$$

其中

$$\Delta t P_{\Delta j} = \frac{c}{2} (u_{j+1} - u_{j-1}) + c\mu (u_{j+2} - 4u_{j+1} + 6u_j - 4u_{j-1} + u_{j-2}), \quad (24)$$

μ 为一个小正数。（23）式相当于 $\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = -\mu(\Delta x)^3 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$ 用中心差分离散得到的格式，显然与 $\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0$ 是相容的。添加 $-\mu(\Delta x)^3 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$ 项的目的在于保证格式的

稳定性（具体原因第 5 章将介绍）。把（24）式代入（18）或（33）式就得到了全离散格式，称为 Jameson 格式。Jameson 格式空间有二阶精度，对于线性问题，时间方向有四阶精度。

如何分析 Jameson 格式的稳定性呢？我们首先考虑半离散格式（23），把 $u_j = Ae^{ikx_j}$ 代入（23）式，有

$$\Delta t \frac{\partial A}{\partial t} = ZA \quad (25)$$

其中 $Z = -c[4\mu(1 - \cos \beta)^2 + i \sin \beta]$, ($\beta = k\Delta x$)。所以（22）式中的第一式对应着

$$A^{(1)} = A^n + \frac{1}{4}ZA^n,$$

第二式对应

$$A^{(2)} = A^n + \frac{1}{3}ZA^{(1)},$$

依此类推，

$$\begin{aligned} A^{n+1} &= A^n + \frac{1}{1}ZA^{(3)} \\ &= A^n + \frac{1}{1}Z(A^n + \frac{1}{2}ZA^{(2)}) \\ &= A^n + \frac{1}{1}Z[A^n + \frac{1}{2}Z(A^n + \frac{1}{3}ZA^{(1)})] \\ &= A^n + \frac{1}{1}Z\{A^n + \frac{1}{2}Z[A^n + \frac{1}{3}Z(A^n + \frac{1}{4}ZA^n)]\} \end{aligned}$$

所以，放大因子为

$$\begin{aligned} \frac{A^{n+1}}{A^n} &= 1 + \frac{1}{1}Z\{1 + \frac{1}{2}Z[1 + \frac{1}{3}Z(1 + \frac{1}{4}ZA^n)]\} \\ &= 1 + \frac{1}{1}Z + \frac{1}{2}Z^2 + \frac{1}{6}Z^3 + \frac{1}{24}Z^4 \end{aligned}$$

由此得 Jameson 格式的稳定性条件为

$$|c| \leq 2\sqrt{2}.$$

具体推导过程请自行完成。

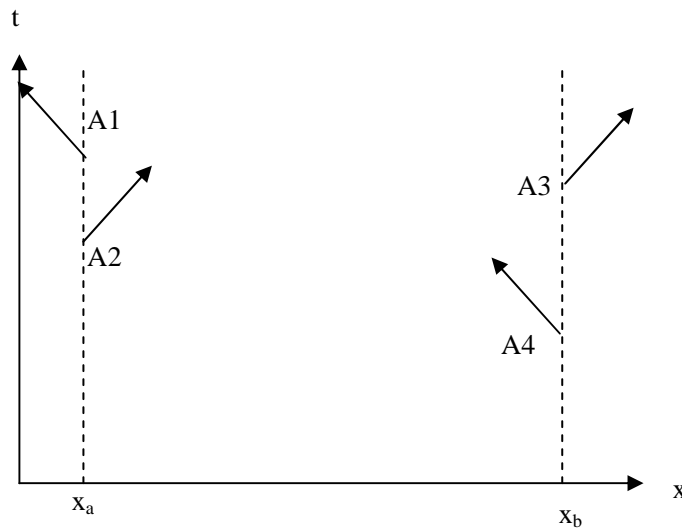


图 3

5 $\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0$ 的边界条件的数值处理

设求解域为 $[x_a, x_b]$ ，把空间求解域分为 M 段， $M+1$ 个网格点的坐标为 $x_0 = x_a, \dots, x_k = k\Delta x, \dots, x_M = x_b$ (图 3)。当 $a > 0$ ，在 $x_0 = x_a$ 处特征线指向求解域内部，此时，应根据实际情况给定 $x_0 = x_a$ 处的标界条件， $u_0^n = f_a(n\Delta t)$ ；在 $x_M = x_b$ 处，特征线指向求解域的外部，此时不能提物理边界条件。但是在数值计算中，我们需要知道 x_M 的物理量的值，此时，可以通过外推的方法确定边界处物理量的值 u_M^n ，如零阶外推： $u_M^n = u_{M-1}^n$ ，或一阶外推 $u_M^n = 2u_{M-1}^n - u_{M-2}^n$ 。如果采用 Lax-Wendroff 格式求解 $\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0$ ，可以证明此时在 $M-1$ 处，格式只有一阶精度。但是，一般认为，在边界处格式的精度比内点低一阶时，不会影响数值计算的整体精度。 $a < 0$ 时的情况可以用类似方法分析。

二、抛物型方程

我们研究模型方程：非定常热传导方程 $\frac{\partial u}{\partial t} = \gamma \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)$ ($\gamma > 0$) 的差分格式和边界条件的数值处理。

1. 差分格式

热传导方程不存在占主导地位的信息传播方向,所以空间导数一般用中心差分离散,时间方向可采用前差和后差。这样,我们就可以得到前面已经介绍过的 FTCS 格式和 BTCS 格式。有趣的是,和双曲型方程的蛙跳格式对应的时空均为中心差分的 CTCS 格式

$$\frac{u_k^{n+1} - u_k^{n-1}}{2\Delta t} = \gamma \frac{u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n}{(\Delta x)^2}$$

是无条件不稳定的,请读者自行证明。可见,热传导方程差分格式的构造必线性对流方程简单。BTCS, FTCS 等格式可以写成统一形式:

$$\frac{u_k^{n+1} - u_k^n}{\Delta t} = \frac{\gamma}{(\Delta x)^2} [\theta(u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n) + (1-\theta)(u_{k+1}^{n+1} - 2u_k^{n+1} + u_{k-1}^{n+1})] \quad (26)$$

称为综合格式,其中 $0 \leq \theta \leq 1$ 。当 $\theta = \frac{1}{2}$ 时,称为 Crank - Nicolson 格式。请自行分析 θ 的取值对稳定性和格式精度的影响。

2. 边界条件

设求解域为 $[x_a, x_b]$, 把空间求解域分为 M 段, $M+1$ 个网格点的坐标为

$x_0 = x_a, \dots, x_k = k\Delta x, \dots, x_M = x_b$ 。热传导方程在求解域的左右边界都需要一个边界条件。边界条件的类型包括第一类边界条件 (Dirichlet 条件), 第二类边界条件 (Neumann 条件) 和第三类边界条件。其中, 第一类边界条件我们已经介绍过了; 第三类边界条件是第一类边界条件和第二类边界条件的组合; 因此, 我们这里只介绍第二类边界条件的处理方法。

在左边界, 第二类边界条件为:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_0^n = b^n. \quad (27)$$

对边界条件的一阶近似为

$$\frac{u_1^n - u_0^n}{\Delta x} = b^n \quad (28)$$
$$u_0^n = u_1^n - \Delta x b^n$$

如果要构造边界条件的二阶近似, 可令边界附近 $u^n(x)$ 的分布满足

$$u^n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2,$$

且

$$\frac{\partial u^n(x_0)}{\partial x} = b^n, u^n(x_1) = u_1^n, u^n(x_2) = u_2^n。$$

由此可以解出 a_0, a_1, a_2 , 从而得到 :

$$u_0^n = \frac{-u_2^n + 4u_1^n - 2\Delta x b^n}{3}。 \quad (29)$$

(28) 或 (29) 式以及内点差分格式构成了一组封闭的代数方程。

三、多维问题

1. 差分格式

实际的流体力学问题一般是多维的, 所以讨论多维问题的差分格式是必要的。在这里, 我们讨论二维对流 - 扩散方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} + b \frac{\partial u}{\partial y} = \gamma \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (30)$$

的差分格式。所谓二维, 我们指空间有两个自变量。从方程的类型上看, 在 $x-t, y-t$ 平面方程是抛物型的, 可以用时间推进的方法求解。从方程的物理意义看, 它包含了对流和扩散的过程, 可以看作 N - S 方程的模型方程。其中, 对流项 $a \frac{\partial u}{\partial x} + b \frac{\partial u}{\partial y}$ 的离散, 可以借鉴线性对流方程中空间导数的离散方法; 而扩散

项 $\gamma \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)$ 的离散, 可以借鉴热传导方程中空间导数的离散方法。

首先, 我们把求解域离散化。假定在 $x-y$ 平面, 求解域是一矩形

$[x_a, x_b] \times [y_c, y_d]$ 。我们把 x 方向等分为 M_x 分, y 方向等分为 M_y 分,

$(x_i, y_j) = (i\Delta x, j\Delta y)$, $i = 0, 1, \dots, M_x; j = 0, 1, \dots, M_y$, $\Delta x = \frac{x_b - x_a}{M_x}, \Delta y = \frac{y_d - y_c}{M_y}$ 。在

时间方向, 时间步长为 Δt , $t_n = n\Delta t$ 。与以前一样, 我们记 $u(i\Delta x, j\Delta y, n\Delta t)$ 为 $u_{i,j}^n$ 。

其次, 我们介绍多维问题差分格式的构造方法。在讨论双曲型方程的差分格式的构造时, 我们总结了四种方法, 即 1) 基于导数逼近, 2) 基于特征理论, 3) 基于时间方向展开, 4) 基于算子分裂的方法。由于对于二维问题, 特征关系定义在所谓特征面上, 所以第二种方法不能直接推广到多维问题。但是除此之外的

三种方法，均可用于多维问题差分格式的构造。下面，我们给出 (30) 的几种差分格式。

1) FTCS 格式：

$$\frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} + a \frac{u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n}{2\Delta x} + b \frac{u_{i,j+1}^n - u_{i,j-1}^n}{2\Delta y} = \gamma \left(\frac{u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{i,j+1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n}{(\Delta y)^2} \right),$$

用差分算子表示：

$$\frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} + a \frac{\bar{\delta}_x u_{i,j}^n}{2\Delta x} + b \frac{\bar{\delta}_y u_{i,j}^n}{2\Delta y} = \gamma \left(\frac{\delta_x^2 u_{i,j}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{\delta_y^2 u_{i,j}^n}{(\Delta y)^2} \right).$$

其截断误差为 $L.T.E. = O((\Delta x)^2, (\Delta y)^2, \Delta t)$ 。

2) 一阶迎风格式：

$$\frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} + a^+ \frac{\nabla_x u_{i,j}^n}{\Delta x} + a^- \frac{\Delta_x u_{i,j}^n}{\Delta x} + b^+ \frac{\nabla_y u_{i,j}^n}{\Delta y} + b^- \frac{\Delta_y u_{i,j}^n}{\Delta y} = \gamma \left(\frac{\delta_x^2 u_{i,j}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{\delta_y^2 u_{i,j}^n}{(\Delta y)^2} \right),$$

其中，

$$a^+ = \frac{a + |a|}{2}, a^- = \frac{a - |a|}{2}, b^+ = \frac{b + |b|}{2}, b^- = \frac{b - |b|}{2}.$$

差分格式的截断误差为 $L.T.E. = O(\Delta x, \Delta y, \Delta t)$ 。

3) 二阶迎风格式

$$\begin{aligned} \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} + \frac{a^+}{\Delta x} \left(\nabla_x + \frac{\nabla_x^2}{2} \right) u_{i,j}^n + \frac{a^-}{\Delta x} \left(\Delta_x - \frac{\Delta_x^2}{2} \right) u_{i,j}^n + \frac{b^+}{\Delta y} \left(\nabla_y + \frac{\nabla_y^2}{2} \right) u_{i,j}^n + \frac{b^-}{\Delta y} \left(\Delta_y - \frac{\Delta_y^2}{2} \right) u_{i,j}^n \\ = \gamma \left(\frac{\delta_x^2 u_{i,j}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{\delta_y^2 u_{i,j}^n}{(\Delta y)^2} \right). \end{aligned}$$

其截断误差为 $L.T.E. = O((\Delta x)^2, (\Delta y)^2, \Delta t)$ 。

4) Crank - Nicolson 格式

上面的几个格式时间方向均为一阶精度。Crank - Nicolson 格式是一个隐式格式，它具有时间方向二阶精度。

$$\begin{aligned} \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} \\ + \frac{a}{4\Delta x} (\bar{\delta}_x u_{i,j}^n + \bar{\delta}_x u_{i,j}^{n+1}) + \frac{b}{4\Delta y} (\bar{\delta}_y u_{i,j}^n + \bar{\delta}_y u_{i,j}^{n+1}). \quad (31) \\ = \frac{\gamma}{2} \left(\frac{\delta_x^2 u_{i,j}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{\delta_y^2 u_{i,j}^n}{(\Delta y)^2} + \frac{\delta_x^2 u_{i,j}^{n+1}}{(\Delta x)^2} + \frac{\delta_y^2 u_{i,j}^{n+1}}{(\Delta y)^2} \right) \end{aligned}$$

显然，Runge - Kutta 方法可以用来构造时间方向高阶精度的显式格式。

2. 近似因式分解方法

二维对流扩散方程的 Crank-Nicolson 格式是一个隐式格式，需要全场联立求解。为了讨论方便，我们把它写为如下形式：

$$\begin{aligned} & (1 + \frac{c_x}{4} \bar{\delta}_x + \frac{c_y}{4} \bar{\delta}_y - \frac{\sigma_x}{2} \delta_x^2 - \frac{\sigma_y}{2} \delta_y^2) u_{i,j}^{n+1} \\ & = (1 - \frac{c_x}{4} \bar{\delta}_x - \frac{c_y}{4} \bar{\delta}_y + \frac{\sigma_x}{2} \delta_x^2 + \frac{\sigma_y}{2} \delta_y^2) u_{i,j}^n \end{aligned} \quad , (32)$$

其中

$$c_x = \frac{a\Delta t}{\Delta x}, c_y = \frac{b\Delta t}{\Delta y}, \sigma_x = \frac{\gamma\Delta t}{(\Delta x)^2}, \sigma_y = \frac{\gamma\Delta t}{(\Delta y)^2}。$$

在一定边界条件下，我们把全场写为矩阵形式：

$$A \mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{b}^n, \quad (33)$$

其中 $\mathbf{u}^{n+1} = (u_{0,0}^{n+1}, u_{1,0}^{n+1}, \dots, u_{M_x,0}^{n+1}, u_{0,1}^{n+1}, u_{1,1}^{n+1}, \dots, u_{M_x,1}^{n+1}, \dots, u_{0,M_y}^{n+1}, u_{1,M_y}^{n+1}, \dots, u_{M_x,M_y}^{n+1})^T$ ，则矩阵

A 是一个五对角阵（请自行验证）。我们前面讲过，对于三对角方程，我们可以采用追赶法直接快速求解；但对于五对角阵对应的线性方程组，一般没有快速的直接解法（在某些特定边界条件下，可能有快速直接解法）。如果采用一般的 Gauss 消去法求解，计算量会随着未知量的增加迅速增大，造成求解效率很低。所以，我们一般用迭代方法求解（以后介绍）。除了迭代法，另一种常用的办法是：近似的把 (32) 式化为两个或多个一维问题求解，这种方法称为交替方向隐式（ADI，即 Alternating Direction Implicit）方法，其中比较常用的一种 ADI 方法就是我们将要介绍的近似因式分解（AF，即 Approximate Factorization）方法。注意：ADI 方法或 AF 方法不是精确的求解 (32) 式，而是近似求解，所以我们必须保证近似求解造成的误差足够小。下面，我们具体介绍 AF 方法。

注意到：

$$\begin{aligned} & (1 + \frac{c_x}{4} \bar{\delta}_x + \frac{c_y}{4} \bar{\delta}_y - \frac{\sigma_x}{2} \delta_x^2 - \frac{\sigma_y}{2} \delta_y^2) u_{i,j}^{n+1} \\ & = (1 + \frac{c_x}{4} \bar{\delta}_x - \frac{\sigma_x}{2} \delta_x^2) (1 + \frac{c_y}{4} \bar{\delta}_y - \frac{\sigma_y}{2} \delta_y^2) u_{i,j}^{n+1} \\ & \quad + (-\frac{c_x c_y}{16} \bar{\delta}_x \bar{\delta}_y + \frac{c_x \sigma_y}{8} \bar{\delta}_x \delta_y^2 + \frac{c_y \sigma_x}{8} \bar{\delta}_y \delta_x^2 - \frac{\sigma_x \sigma_y}{4} \delta_x^2 \delta_y^2) u_{i,j}^{n+1} \\ & = (1 + \frac{c_x}{4} \bar{\delta}_x - \frac{\sigma_x}{2} \delta_x^2) (1 + \frac{c_y}{4} \bar{\delta}_y - \frac{\sigma_y}{2} \delta_y^2) u_{i,j}^{n+1} + O((\Delta t)^2) \end{aligned}$$

略去 $O((\Delta t)^2)$ 项，则 (32) 式可以化为

$$\begin{aligned}
& (1 + \frac{c_x}{4} \bar{\delta}_x - \frac{\sigma_x}{2} \delta_x^2)(1 + \frac{c_y}{4} \bar{\delta}_y - \frac{\sigma_y}{2} \delta_y^2) u_{i,j}^{n+1} \\
& = (1 - \frac{c_x}{4} \bar{\delta}_x - \frac{c_y}{4} \bar{\delta}_y + \frac{\sigma_x}{2} \delta_x^2 + \frac{\sigma_y}{2} \delta_y^2) u_{i,j}^n
\end{aligned} \quad (34)$$

(34) 式可以分两步求解

$$\begin{aligned}
1) \quad & (1 + \frac{c_x}{4} \bar{\delta}_x - \frac{\sigma_x}{2} \delta_x^2) u_{i,j}^* = (1 - \frac{c_x}{4} \bar{\delta}_x - \frac{c_y}{4} \bar{\delta}_y + \frac{\sigma_x}{2} \delta_x^2 + \frac{\sigma_y}{2} \delta_y^2) u_{i,j}^n \\
2) \quad & (1 + \frac{c_y}{4} \bar{\delta}_y - \frac{\sigma_y}{2} \delta_y^2) u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^*
\end{aligned} \quad (35)$$

显然，每一步我们只需求解一个三对角矩阵。这种方法大大提高了计算效率，但代价是，格式在时间方向只有一阶精度，而原始的 Crank - Nicolson 格式在时间方向有二阶精度。

为了使格式在时间方向仍为二阶精度，我们注意到 (32) 式的右侧也可以近似因式分解：

$$\begin{aligned}
& (1 - \frac{c_x}{4} \bar{\delta}_x - \frac{c_y}{4} \bar{\delta}_y + \frac{\sigma_x}{2} \delta_x^2 + \frac{\sigma_y}{2} \delta_y^2) u_{i,j}^n \\
& = (1 - \frac{c_x}{4} \bar{\delta}_x + \frac{\sigma_x}{2} \delta_x^2)(1 - \frac{c_y}{4} \bar{\delta}_y + \frac{\sigma_y}{2} \delta_y^2) u_{i,j}^n \\
& \quad + (-\frac{c_x c_y}{16} \bar{\delta}_x \bar{\delta}_y + \frac{c_x \sigma_y}{8} \bar{\delta}_x \delta_y^2 + \frac{c_y \sigma_x}{8} \bar{\delta}_y \delta_x^2 - \frac{\sigma_x \sigma_y}{4} \delta_x^2 \delta_y^2) u_{i,j}^n
\end{aligned}$$

则

$$\begin{aligned}
& (1 + \frac{c_x}{4} \bar{\delta}_x + \frac{c_y}{4} \bar{\delta}_y - \frac{\sigma_x}{2} \delta_x^2 - \frac{\sigma_y}{2} \delta_y^2) u_{i,j}^{n+1} - (1 - \frac{c_x}{4} \bar{\delta}_x - \frac{c_y}{4} \bar{\delta}_y + \frac{\sigma_x}{2} \delta_x^2 + \frac{\sigma_y}{2} \delta_y^2) u_{i,j}^n \\
& = (1 + \frac{c_x}{4} \bar{\delta}_x - \frac{\sigma_x}{2} \delta_x^2)(1 + \frac{c_y}{4} \bar{\delta}_y - \frac{\sigma_y}{2} \delta_y^2) u_{i,j}^{n+1} - (1 - \frac{c_x}{4} \bar{\delta}_x + \frac{\sigma_x}{2} \delta_x^2)(1 - \frac{c_y}{4} \bar{\delta}_y + \frac{\sigma_y}{2} \delta_y^2) u_{i,j}^n \\
& \quad + (-\frac{c_x c_y}{16} \bar{\delta}_x \bar{\delta}_y + \frac{c_x \sigma_y}{8} \bar{\delta}_x \delta_y^2 + \frac{c_y \sigma_x}{8} \bar{\delta}_y \delta_x^2 - \frac{\sigma_x \sigma_y}{4} \delta_x^2 \delta_y^2)(u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n) \\
& = (1 + \frac{c_x}{4} \bar{\delta}_x - \frac{\sigma_x}{2} \delta_x^2)(1 + \frac{c_y}{4} \bar{\delta}_y - \frac{\sigma_y}{2} \delta_y^2) u_{i,j}^{n+1} - (1 - \frac{c_x}{4} \bar{\delta}_x + \frac{\sigma_x}{2} \delta_x^2)(1 - \frac{c_y}{4} \bar{\delta}_y + \frac{\sigma_y}{2} \delta_y^2) u_{i,j}^n \\
& \quad + O((\Delta t)^3).
\end{aligned}$$

略去 $O((\Delta t)^3)$ 项，有

$$\begin{aligned}
& (1 + \frac{c_x}{4} \bar{\delta}_x - \frac{\sigma_x}{2} \delta_x^2)(1 + \frac{c_y}{4} \bar{\delta}_y - \frac{\sigma_y}{2} \delta_y^2) u_{i,j}^{n+1} \\
& = (1 - \frac{c_x}{4} \bar{\delta}_x + \frac{\sigma_x}{2} \delta_x^2)(1 - \frac{c_y}{4} \bar{\delta}_y + \frac{\sigma_y}{2} \delta_y^2) u_{i,j}^n
\end{aligned}$$

上式可以分为两步求解，

$$\begin{aligned}
1) \quad & (1 + \frac{c_x}{4} \bar{\delta}_x - \frac{\sigma_x}{2} \delta_x^2) u_{i,j}^* = (1 - \frac{c_x}{4} \bar{\delta}_x + \frac{\sigma_x}{2} \delta_x^2) (1 - \frac{c_y}{4} \bar{\delta}_y + \frac{\sigma_y}{2} \delta_y^2) u_{i,j}^n \\
2) \quad & (1 + \frac{c_y}{4} \bar{\delta}_y - \frac{\sigma_y}{2} \delta_y^2) u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^*
\end{aligned} \quad (36)$$

显然, (36) 式在时间方向仍有二阶精度。

AF 方法的另一个值得注意的问题是, 在 (35) \ (36) 式中引入了中间变量 $u_{i,j}^*$ 。

在求解 (35) \ (36) 中的第 (1) 式时, 必须在 $i=0$ 和 $i=M_x$ 处给定 $u_{i,j}^*$ 的边界条件, 而理论上, 边界处的 $u_{i,j}^*$ 是未知的! 那么, 如何给定 $u_{i,j}^*$ 的边界条件呢? 以左边界 ($i=0$) 为例, 注意到:

$$u_{i,j}^* = (1 + \frac{c_y}{4} \bar{\delta}_y - \frac{\sigma_y}{2} \delta_y^2) u_{i,j}^{n+1},$$

我们假定这个关系在边界处成立, 即:

$$u_{0,j}^* = (1 + \frac{c_y}{4} \bar{\delta}_y - \frac{\sigma_y}{2} \delta_y^2) u_{0,j}^{n+1}. \quad (37)$$

如果物理边界条件是第一类边界条件, 则 $u_{0,j}^{n+1}$ 已知。注意到, (37) 式中只涉及到 y 方向差分, 因此 (37) 式右侧不包含未知量, 则我们可以用 (37) 式作为 $u_{i,j}^*$ 的边界条件 (在角点 $(i,j)=(0,0)$ 和 $(i,j)=(0,M_y)$ 处, (37) 式中的中心差分要改为单侧差分)。如果物理边界条件为第二类边界条件 $\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_0^n = b^n$, 则 $u_{0,j}^{n+1}$ 未知。此

时, 我们可以根据 $u_{0,j}^n = u_{1,j}^n - \Delta x b_j^n$ 算出 $u_{0,j}^n$, 而 $u_{i,j}^*$ 的边界条件为

$$u_{0,j}^* = (1 + \frac{c_y}{4} \bar{\delta}_y - \frac{\sigma_y}{2} \delta_y^2) (2u_{0,j}^n - u_{0,j}^{n-1}). \quad (38)$$

当然, 如果对精度要求不高, $u_{i,j}^*$ 最简单的边界处理方法是

$$u_{0,j}^* = u_{0,j}^n. \quad (39)$$

3. 多维问题差分格式的稳定性分析

多维问题的稳定性分析方法与一维问题类似。我们把数值解展开为二维的有限离散 Fourier 级数，并只取其中的一个波代入差分方程，求出放大因子，通过要求放大因子的模小于 1, 可以得到稳定性条件。我们以二维热传导方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} + b \frac{\partial u}{\partial y} = \gamma \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)$$

的综合格式

$$\frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} = \gamma [(1-\theta) \left(\frac{\delta_x^2 u_{i,j}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{\delta_y^2 u_{i,j}^n}{(\Delta y)^2} \right) + \theta \left(\frac{\delta_x^2 u_{i,j}^{n+1}}{(\Delta x)^2} + \frac{\delta_y^2 u_{i,j}^{n+1}}{(\Delta y)^2} \right)]$$

为例介绍多维问题的稳定性分析方法。

令 $u_{i,j}^n = A^n e^{i(k_x x_i + k_y y_j)}$ ，代入上式，得

$$G = \frac{A^{n+1}}{A^n} = \frac{1 - 4(1-\theta) [\sigma_x \sin^2(\frac{k_x \Delta x}{2}) + \sigma_y \sin^2(\frac{k_y \Delta y}{2})]}{1 + 4\theta [\sigma_x \sin^2(\frac{k_x \Delta x}{2}) + \sigma_y \sin^2(\frac{k_y \Delta y}{2})]}$$

令 $B = \sigma_x \sin^2(\frac{k_x \Delta x}{2}) + \sigma_y \sin^2(\frac{k_y \Delta y}{2})$ ，则

$$G = \frac{1 - 4(1-\theta)B}{1 + 4\theta B}。$$

当 $\theta \geq \frac{1}{2}$ 时，令 $\theta = \frac{1}{2} + \Theta, 0 \leq \Theta \leq \frac{1}{2}$ ，则

$$G = \frac{1 + 4B\Theta - 2B}{1 + 4B\Theta + 2B}$$

$$|G| = \left| \frac{1 + 4B\Theta - 2B}{1 + 4B\Theta + 2B} \right|。$$

注意到

$$\begin{aligned} |1 + 4B\Theta - 2B| &\leq |1 + 4B\Theta| + |2B| \\ &= 1 + 4B\Theta + 2B = |1 + 4B\Theta + 2B| \end{aligned}，$$

所以 $|G| \leq 1$ 。即 $\theta \geq \frac{1}{2}$ 时，差分格式无条件稳定。

当 $\theta < \frac{1}{2}$ 时，令 $\theta = \frac{1}{2} - \Theta, 0 < \Theta \leq \frac{1}{2}$ 。此时

$$G = \frac{1 - 4B\Theta - 2B}{1 - 4B\Theta + 2B}$$

$$|G| = \left| \frac{1 - 4B\Theta - 2B}{1 - 4B\Theta + 2B} \right|。$$

当 $1-4B\Theta \geq 0$ 时，显然 $|G| \leq 1$ ；当 $1-4B\Theta < 0$ ，有 $|G| > 1$ 。所以稳定性条件为

$$\begin{aligned} B &\leq \frac{1}{4\Theta} = \frac{1}{2(1-2\theta)} \\ \Leftrightarrow \sigma_x + \sigma_y &\leq \frac{1}{2(1-2\theta)} \\ \Leftrightarrow \gamma\Delta t \left(\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2} \right) &\leq \frac{1}{2(1-2\theta)}。 \end{aligned}$$

当 $\theta = 0$ 时，综合格式化为 FTCS 格式，因此，FTCS 格式的稳定性条件为

$$\gamma\Delta t \left(\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2} \right) \leq \frac{1}{2}。$$

如果取 $\Delta x = \Delta y$ ，则 $\Delta t \leq \frac{(\Delta x)^2}{4\gamma}$ 。对比一维 FTCS 格式的稳定性条件可知多维问题的稳定性条件一般更为严格。

§6 有限体积方法

一、积分型守恒方程

我们研究一维线性对流方程 $\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0$ 的有限体积方法。必须明确，有限体积方法的出发方程是积分型的守恒方程，因此我们首先要寻找 $\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0$ 对应的积分型守恒方程。第一章里，我们讲过微分型的守恒方程在有限控制体上积分，利用 Gauss 公式，就可以得到积分型的守恒方程。对于 $\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0$ 而言，其守恒形式为

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = 0, \quad (1)$$

其中 $f = au$ 。在控制体 $[x_1, x_2]$ 上积分 (1) 式，可得积分型守恒方程为

$$\begin{aligned} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial u}{\partial t} dx + f_2 - f_1 &= 0 \\ f_1 &= f(u(x_1)), f_2 = f(u(x_2)) \end{aligned} \quad (2)$$

二、网格生成

设求解域为 $[x_a, x_b]$ ，我们把求解域等分为 M 分， $\Delta x = \frac{x_b - x_a}{M}$ ，定义

$$\begin{aligned} x_{1/2} &= x_a \\ x_{j+1/2} &= j\Delta x, \quad j = 0, 1, \dots, M \\ x_{M+1/2} &= x_b \end{aligned}$$

数值解 u_j 存储在 $x_j = \frac{x_{j+1/2} + x_{j-1/2}}{2}$ 。我们把区域 $[x_{j-1/2}, x_{j+1/2}]$ 称为第 j 个控制体，

显然，数值解 u_j 存储在第 j 个控制体中心（图 1）。有时为了方便，我们也称第 j 个控制体中心为第 j 个网格点。

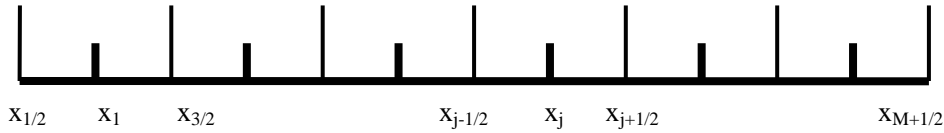


图 1 有限体积网格

时间方向的离散与有限差分方法相同，在给定 Δt 后， $t_n = n\Delta t$ 。

三、有限体积方法（1）：基于控制体上数值积分的有限体积方法

把（2）式应用于第 j 个控制体，有

$$\int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \frac{\partial u}{\partial t} dx + f_{j+1/2} - f_{j-1/2} = 0, \quad (3)$$

其中 $f_{j-1/2} = au_{j-1/2}$ ， $f_{j+1/2} = au_{j+1/2}$ 。把（3）式沿时间方向在 $[t_n, t_{n+1}]$ 之间积分，有

$$\int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} (u^{n+1} - u^n) dx + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f_{j+1/2} dt - \int_{t_n}^{t_{n+1}} f_{j-1/2} dt = 0. \quad (4)$$

到目前为止，我们没有引入任何近似，所以，（4）式是精确成立的。与有限差分方法类似，在有限体积方法中，我们需要把所有的积分项化为代数形式。（4）式的第一项，采用数值积分中的中点公式，有

$$\int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} (u^{n+1} - u^n) dx = \Delta x (u_j^{n+1} - u_j^n) + O(\Delta t (\Delta x)^3) \quad (5)$$

对于（4）中的通量项 $\int_{t_n}^{t_{n+1}} f_{j+1/2} dt$ ， $\int_{t_n}^{t_{n+1}} f_{j-1/2} dt$ ，我们用基于 t_n 的矩形公式，有

$$\begin{aligned}\int_{t_n}^{t_{n+1}} f_{j+1/2} dt &= \Delta t \hat{f}_{j+1/2}^n + O((\Delta t)^2) \\ \int_{t_n}^{t_{n+1}} f_{j-1/2} dt &= \Delta t \hat{f}_{j-1/2}^n + O((\Delta t)^2)\end{aligned}, \quad (6a)$$

其中

$$\hat{f}_{j+1/2}^n = au_{j+1/2}^n, \hat{f}_{j-1/2}^n = au_{j-1/2}^n \quad (6b)$$

称为数值通量。

因为数值解 u_j^n 存储在网格点 x_j 处，所以必须把数值通量中的 $u_{j\pm 1/2}^n$ 用网格点上的数值解近似。不同的近似方法就构成了不同的有限体积格式。假定 $a > 0$ ，考虑到特征线的走向，下面的近似是合理的：

$$u_{j+1/2}^n = u_j^n + O(\Delta x), u_{j-1/2}^n = u_{j-1}^n + O(\Delta x) \quad (7)$$

把 (5) ~ (7) 代入 (4) 式并略去高阶小量，我们有

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} = 0 \quad (8)$$

显然，这就是前面介绍过的一阶迎风格式。它在时间和空间方向都是一阶精度。

为了提高空间精度，我们可以对 (7) 式进行改进

$$u_{j+1/2}^n = 1.5u_j^n - 0.5u_{j-1}^n + O((\Delta x)^2), u_{j-1/2}^n = 1.5u_{j-1}^n - 0.5u_{j-2}^n + O((\Delta x)^2)。 \quad (8)$$

把 (5)、(6)、(8) 式代入 (4) 式并略去高阶小量可以得到

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a \frac{(-3u_j^n + 4u_{j+1}^n - u_{j+2}^n)}{2\Delta x} = 0。 \quad (9)$$

这就是二阶迎风格式，它在时间方向为一阶精度，空间方向为二阶精度。

由于通量项用矩形公式近似，所以在时间方向只有一阶精度。改善时间精度的方法是对通量项采用更精确的数值积分公式，如中点公式

$$\begin{aligned}\int_{t_n}^{t_{n+1}} f_{j+1/2} dt &= \Delta t \hat{f}_{j+1/2}^n + O((\Delta t)^2) \\ \int_{t_n}^{t_{n+1}} f_{j-1/2} dt &= \Delta t \hat{f}_{j-1/2}^n + O((\Delta t)^2)\end{aligned}, \quad (10a)$$

$$\hat{f}_{j+1/2}^n = au_{j+1/2}^{n+1/2}, \hat{f}_{j-1/2}^n = au_{j-1/2}^{n+1/2}。 \quad (10b)$$

计算 $u_{j\pm 1/2}^{n+1/2}$ 可以有多种方案，我们只讨论其中的一种。以 $u_{j+1/2}^{n+1/2}$ 为例，我们可以在

$j+1/2$ 处构造下面的差分方程

$$\frac{u_{j+1/2}^{n+1/2} - u_{j+1/2}^n}{\Delta t/2} + a \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{\Delta x} = 0,$$

其中， $u_{j+1/2}^n = \frac{u_{j+1}^n + u_j^n}{2}$ 。所以，

$$u_{j+1/2}^{n+1/2} = \frac{u_{j+1}^n + u_j^n}{2} - a\Delta t \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{2\Delta x} \quad (11a)$$

同理可以得到

$$u_{j-1/2}^{n+1/2} = \frac{u_j^n + u_{j-1}^n}{2} - a\Delta t \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} \quad (11b)$$

由 (11) 式, 我们可以得到有限体积格式为

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a \frac{(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n)}{2\Delta x} = \frac{a^2 \Delta t}{2\Delta x^2} (u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n) \quad (12)$$

这就是我们熟知的 Lax - Wendroff 格式, 它在时间和空间方向均为二阶精度。

综上所述, 对于一维问题, 有限体积方法和有限差分方法是等价的。事实上, 对于多维问题, 当控制体为矩形 (二维) 或长方体 (三维) 时, 二者在某种意义上也是等价的。因此, 有限体积方法和有限差分方法有密切的联系。有限差分方法的相容性、收敛性和稳定性概念以及稳定性分析方法, 对于有限体积方法也是适用的。当多维问题中, 控制体不是矩形 (二维) 或长方体 (三维) 时, 有限体积方法和有限差分方法不再等价。一般认为, 有限体积方法对于复杂的求解域形状有较好的适应性, 而且也更适于计算包含间断的流场。最后, 我们指出, 本小节所述的有限体积方法均可写为

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a \frac{\hat{f}_{j+1/2}^n - \hat{f}_{j-1/2}^n}{\Delta x} = 0 \quad (13)$$

的形式。

四、有限体积方法 (2): 基于单元平均值的有限体积方法

上小节中所述有限体积方法中, 我们对时间项采用了下列中点公式

$$\int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} (u^{n+1} - u^n) dx = \Delta x (u_j^{n+1} - u_j^n) + O(\Delta t (\Delta x)^3) \quad (5)$$

近似积分 $\int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} (u^{n+1} - u^n) dx$ 。由此得到的有限体积格式在空间最多能达到二阶精度。

如果需要构造高于空间二阶精度的有限体积格式, 就需要引入基于单元平均值的有限体积方法的概念。这里所说的单元, 就是指控制体。

我们曾经指出, (4) 式是精确成立的。我们从此式出发讨论基于单元平均值的有限体积方法的概念。定义数值解在单元内的平均值为

$$\bar{u}_j^n = \frac{\int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} u^n dx}{\Delta x} \quad (14)$$

则 (4) 式可以写为

$$\frac{\bar{u}_j^{n+1} - \bar{u}_j^n}{\Delta t} + \frac{\hat{f}_{j+1/2}^n - \hat{f}_{j-1/2}^n}{\Delta x} = 0, \quad (15a)$$

其中

$$\hat{f}_{j+1/2}^n = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f_{j+1/2} dt, \quad \hat{f}_{j-1/2}^n = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f_{j-1/2} dt \quad (15b)。$$

由 (15b)，可知数值通量 $\hat{f}_{j+1/2}^n$ 为 $f_{j+1/2}$ 在 $[t_n, t_{n+1}]$ 之间的平均值。(15) 式为一维问题有限体积方法的标准形式，到目前为止，它是精确的。

注意到 $\hat{f}_{j+1/2}^n = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(u_{j+1/2}(t)) dt$ ，即为了计算数值通量，我们必须求得 $[t_n, t_{n+1}]$ 之间的 $u_{j+1/2}(t)$ 。但是，由 (15) 式，已知量只有 t_n 时刻单元平均值 \bar{u}_j^n 。

所以，为了求出 $u_{j+1/2}(t)$ ，必须解决如下的两个问题：

1) 由 $\bar{u}_k^n, k=1, 2, \dots, M$ ，求出 t_n 时刻数值解沿 x 方向的分布 $u^n(x)$ ，这一过程称为重构 (Reconstruction)。

2) 由 t_n 时刻数值解沿 x 方向的分布 $u^n(x)$ ，求出 $[t_n, t_{n+1}]$ 之间的 $u_{j+1/2}(t)$ 以及数值

通量 $\hat{f}_{j+1/2}^n = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(u_{j+1/2}(t)) dt$ ，这一过程称为演化过程。

有限体积方法中在这两个过程中将引入各种近似。下面分别讨论这两个过程。

1. 重构

最简单的重构过程为零阶重构，它假定 $u^n(x)$ 为分段常数，具体说是在每个控制体内物理量的分布为常数，即 $\forall j, u^n(x)|_{x \in [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}]} = \text{const}$ 。由 (14) 式，可知

$$\forall j, u^n(x)|_{x \in [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}]} = \bar{u}_j^n。 \quad (16)$$

比零阶重构更精确的近似是所谓线性重构，即假定 $u^n(x)$ 为分段线性函数：

$\forall j, u^n(x)|_{x \in [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}]} = u_j^n + D_j(x - x_j)$ 。把这个关系代入 (14) 式，有

$$\bar{u}_j^n = \frac{\int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} [u_j^n + D_j(x - x_j)] dx}{\Delta x} = u_j^n。$$

可见，在线性重构近似下，

$$u_j^n = \bar{u}_j^n，$$

即

$$\forall j, u^n(x)|_{x \in [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}]} = \bar{u}_j^n + D_j(x - x_j) \quad (17)$$

现在 D_j 仍是未知的，确定 D_j 的方法可以有很多种，其中之一是把

$u^n(x)|_{x \in [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}]} = \bar{u}_j^n + D_j(x - x_j)$ 延拓到第 $j-1$ 单元，要求其平均值为 \bar{u}_{j-1}^n ，即

$$\bar{u}_{j-1}^n = \frac{\int_{x_{j-3/2}}^{x_{j-1/2}} [\bar{u}_j^n + D_j(x - x_j)] dx}{\Delta x} = \bar{u}_j^n - D_j \Delta x ,$$

由此得：

$$D_j = \frac{\bar{u}_j^n - \bar{u}_{j-1}^n}{\Delta x} \quad (18)$$

另一种方法是把 $u^n(x)|_{x \in [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}]} = u_j^n + D_j(x - x_j)$ 延拓到第 $j+1$ 单元，要求其平均值为 \bar{u}_{j+1}^n 。此时

$$D_j = \frac{\bar{u}_{j+1}^n - \bar{u}_j^n}{\Delta x} \quad (19)$$

更高阶的重构方法超出了本书的范围，在此不再介绍。在研究生的计算流体力学课程中，将详细介绍高阶的重构方法（ENO/WENO 格式）。这里我们指出，理论上，可以进行任意阶次的重构。

2 演化过程

演化过程的本质是要计算 $\hat{f}_{j+1/2}^n = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(u_{j+1/2}(t)) dt$ 。在重构以后，我们知道了数值解的分布 $u^n(x)$ ，所以上一小节所述的计算数值通量的方法仍然适用。然而，利用重构的结果和解沿特征线不变这一事实，我们可以更准确的计算线性对流方程的数值通量 $\hat{f}_{j+1/2}^n = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(u_{j+1/2}(t)) dt$ 。

考虑 $a > 0$ 的情况，根据特征关系，有

$$u_{j+1/2}(t) = u^n(x_{j+1/2} - a(t - t_n)) \quad (20)$$

1) 当采用零阶重构时，由 (20) 式

$$u_{j+1/2}(t) = u^n(x_{j+1/2} - a(t - t_n)) = \bar{u}_j^n ,$$

所以，

$$\hat{f}_{j+1/2}^n = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(u_{j+1/2}(t)) dt = a \bar{u}_j^n ,$$

同理

$$\hat{f}_{j-1/2}^n = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(u_{j-1/2}(t)) dt = a \bar{u}_{j-1}^n \circ$$

把数值通量表达式代入 (15a) 式, 得

$$\frac{\bar{u}_j^{n+1} - \bar{u}_j^n}{\Delta t} + a \frac{\bar{u}_j^n - \bar{u}_{j-1}^n}{\Delta x} = 0 \quad (21)$$

注意到零阶重构时 $u_j^n = \bar{u}_j^n$, 所以 (21) 式实际上是一阶迎风格式。

2) 当采用线性重构时, 由 (20) 式,

$$u_{j+1/2}(t) = u^n(x_{j+1/2} - a(t - t_n))$$

以及 $\forall j, u^n(x)|_{x \in [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}]} = \bar{u}_j^n + D_j(x - x_j)$, 可得

$$\begin{aligned} u_{j+1/2}(t) &= \bar{u}_j^n + D_j(x_{j+1/2} - a(t - t_n) - x_j) \\ &= \bar{u}_j^n + D_j\left(\frac{\Delta x}{2} - a(t - t_n)\right) \end{aligned} \quad (22)$$

所以,

$$\hat{f}_{j+1/2}^n = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(u_{j+1/2}(t)) dt = a(\bar{u}_j^n + D_j \frac{\Delta x}{2}) - \frac{a^2}{2} D_j \Delta t,$$

同理

$$\hat{f}_{j-1/2}^n = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(u_{j-1/2}(t)) dt = a(\bar{u}_{j-1}^n + D_{j-1} \frac{\Delta x}{2}) - \frac{a^2}{2} D_{j-1} \Delta t.$$

把数值通量表达式代入 (15a) 式, 得

$$\frac{\bar{u}_j^{n+1} - \bar{u}_j^n}{\Delta t} + a \frac{(\bar{u}_j^n + D_j \frac{\Delta x}{2}) - (\bar{u}_{j-1}^n + D_{j-1} \frac{\Delta x}{2})}{\Delta x} = \frac{a^2}{2} \Delta t (D_j - D_{j-1}) \quad (23)$$

当取 $D_j = \frac{\bar{u}_j^n - \bar{u}_{j-1}^n}{\Delta x}$ 时, 有

$$\frac{\bar{u}_j^{n+1} - \bar{u}_j^n}{\Delta t} + a \frac{(-3\bar{u}_j^n + 4\bar{u}_{j+1}^n - \bar{u}_{j+2}^n)}{2\Delta x} = \frac{a^2 \Delta t}{2\Delta x^2} (\bar{u}_j^n - 2\bar{u}_{j+1}^n + \bar{u}_{j+2}^n). \quad (24)$$

当取 $D_j = \frac{\bar{u}_{j+1}^n - \bar{u}_j^n}{\Delta x}$ 时, 有

$$\frac{\bar{u}_j^{n+1} - \bar{u}_j^n}{\Delta t} + a \frac{(\bar{u}_{j+1}^n - \bar{u}_{j-1}^n)}{2\Delta x} = \frac{a^2 \Delta t}{2\Delta x^2} (\bar{u}_{j-1}^n - 2\bar{u}_j^n + \bar{u}_{j+1}^n). \quad (25)$$

注意到, 在线性重构时有 $u_j^n = \bar{u}_j^n$, 所以 (24) (25) 式分别为 Warming - Beam

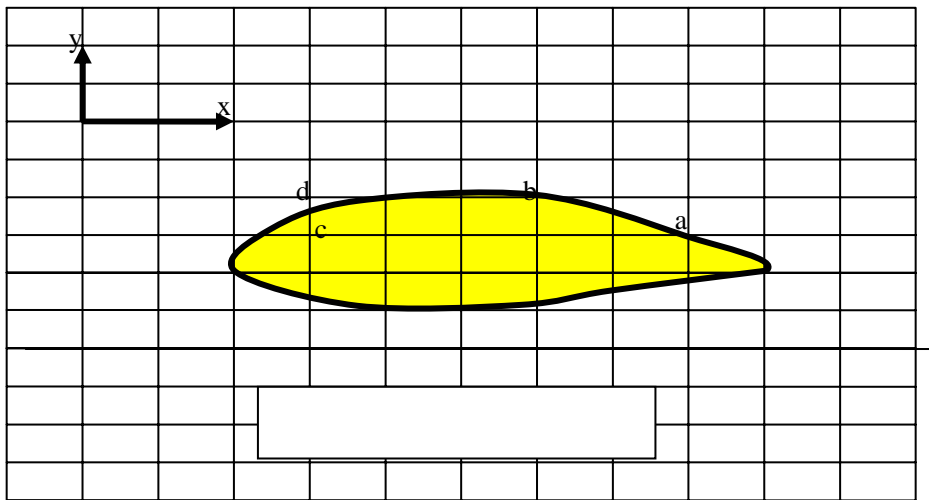
和 Lax - Wendroff 格式。

可以看出, 当演化步用精确的特征关系计算时, 有限体积的精度取决于重构步。当采用零阶重构时, 格式具有时空一阶精度; 当采用线性重构时, 格式具有时空二阶精度。在研究生计算流体力学课程中, 我们还将研究对于流体力学 Euler 方程演化步的计算方法, 其中之一是通过求解或近似求解气体力学中的 Riemann 问题来实现。

第三章 贴体网格及其生成

§1 概述

上一章,我们介绍了标量偏微分方程的差分 and 有限体积格式,除了一维问题外,还简单介绍了多维问题的差分格式。把这些方法应用于流体力学方程的数值模拟还必须解决一个重要问题,就是复杂求解域形状处理问题。考虑下面的问题:一个二维翼型在无界流体中匀速运动,我们把参考系建立在翼型上,则可以认为翼型静止,远场来流速度恒定。要计算翼型周围的流场,必须生成计算网格。由于在计算中无法直接模拟无穷大的流动区域,我们可以近似的取一个足够大的



包围翼型的有限区域。我们取这个区域为一个矩形,并在 x, y 方向作均匀剖分。

这样我们就得到图 1 所示的矩形网格。矩形网格形状虽然简单,但是对于数值计算而言,却产生了一系列复杂问题。如:

(1) 某些网格点在求解域内部(如 c 点),这些点上的数值解如何确定,其含义是什么?

(2) 只有少数网格点(如 a, b)在翼型表面上,其他大部分网格点则不在翼型上。如 d 点,它在翼型之外,但相当靠近翼型,其下面相邻的网格点 c 在翼型之内。那么, d 点的差分格式如何构造? d, c 之间的边界条件如何起作用?

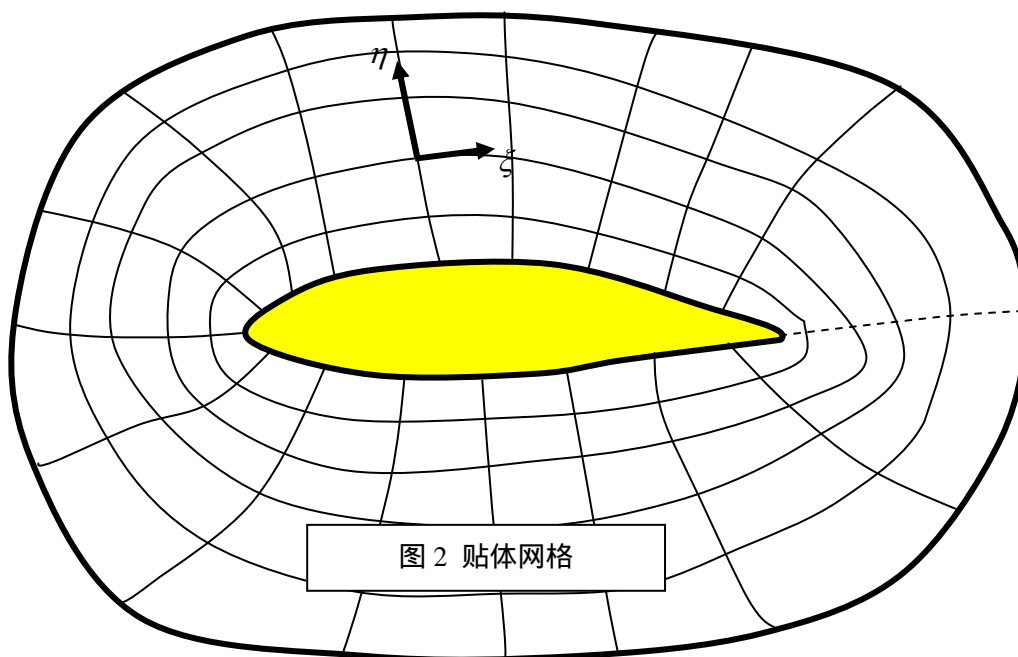


图 2 贴体网格

理论上，我们可以解决这些问题，但其后果是数值方法要考虑多种情况，因而比较复杂，通用性差；而且固壁边界附近的差分格式精度难于提高。为了解决这些问题，一个常用的方法是采用所谓“贴体网格”（图 2）。贴体网格可以看作由任意曲线坐标 (ξ, η) 的坐标线组成的网格。其中，在翼型表面 $\eta = \eta_{\min}$ ，在远场

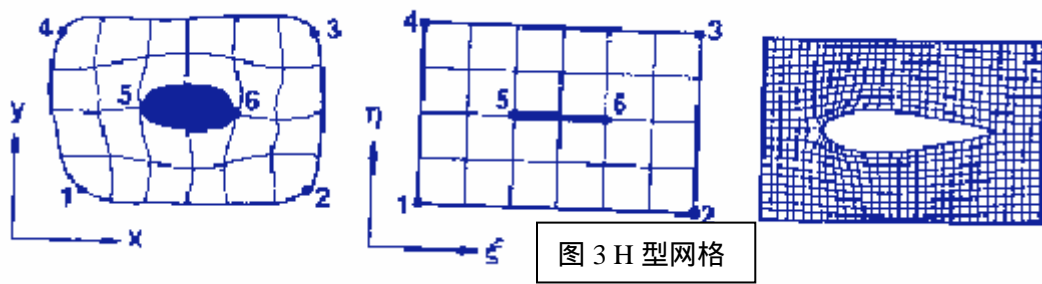
$\eta = \eta_{\max}$ ，在翼型表面和远场之间的环绕翼型的网格线上 $\eta_{\min} < \eta = \text{const} < \eta_{\max}$ ；

在每一条从翼型出发到远场中止的网格线上都有 $\xi = \text{const}$ 。对于本例，由于求解域不是单连通的，通常用图中的虚线把求解域割开，使之变为单连通域。该虚线构成了 ξ 方向的边界，它既对应着 ξ_{\min} ，也对应着 ξ_{\max} ，即 ξ_{\min} 和 ξ_{\max} 是重合的（虚线的位置理论上可以取任意一条 $\xi = \text{const}$ 的坐标线）。具有这种性质的网格称为

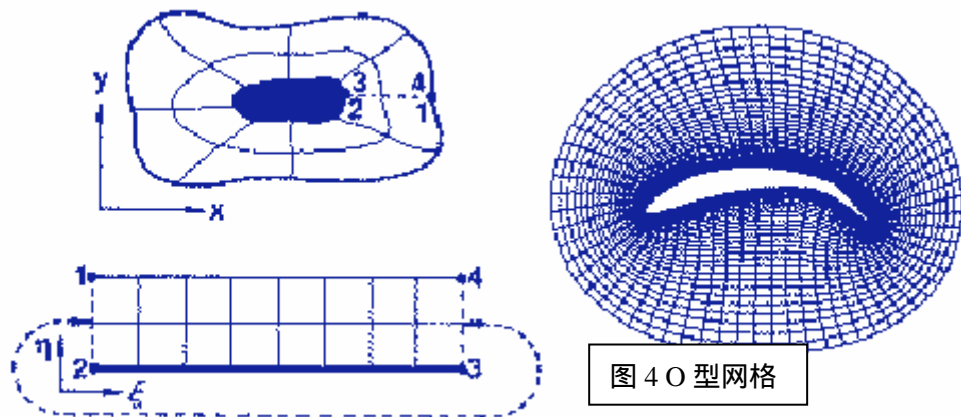
O 型网格。注意对于一般情况， ξ_{\min} 和 ξ_{\max} 不一定重合。由于上述网格中，计算区域的所有边界均为一条曲线坐标的网格线，所以这种网格称为“贴体网格”。由于计算域的边界是 (ξ, η) 坐标系的坐标线，所以计算平面为一矩形区域（图 3，图 4，图 5）。

贴体网格有如下几种常见的类型。

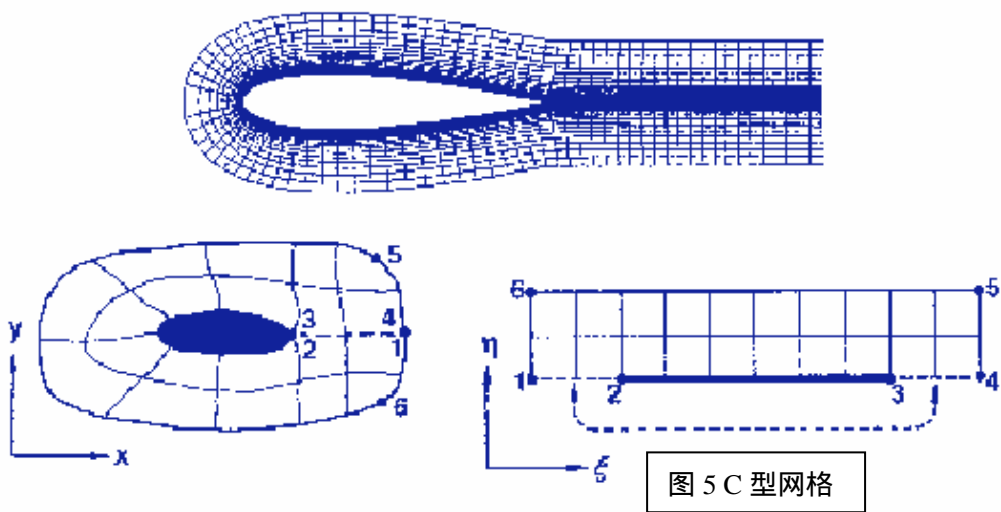
(1) H 型网格



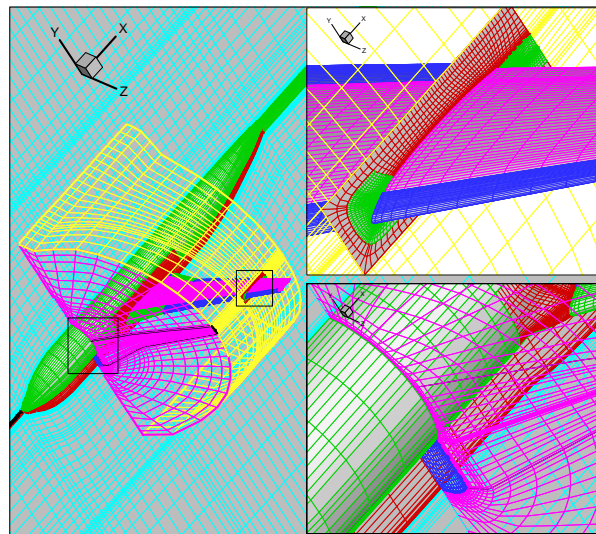
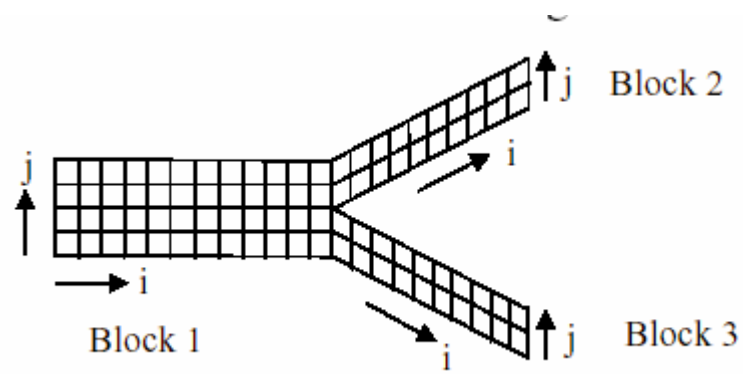
(2) O 形网格



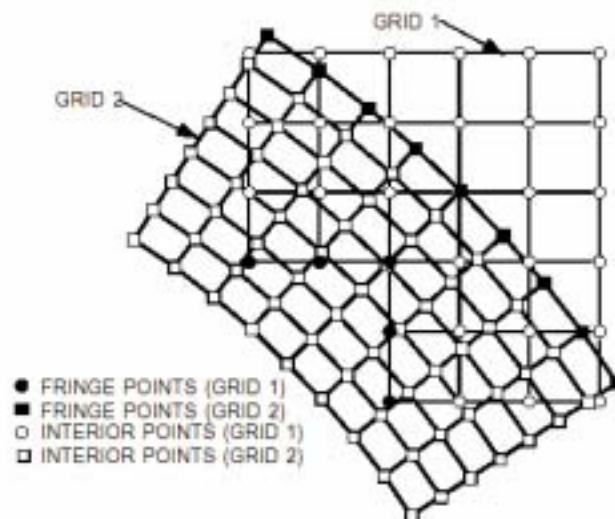
(3) C 形网格

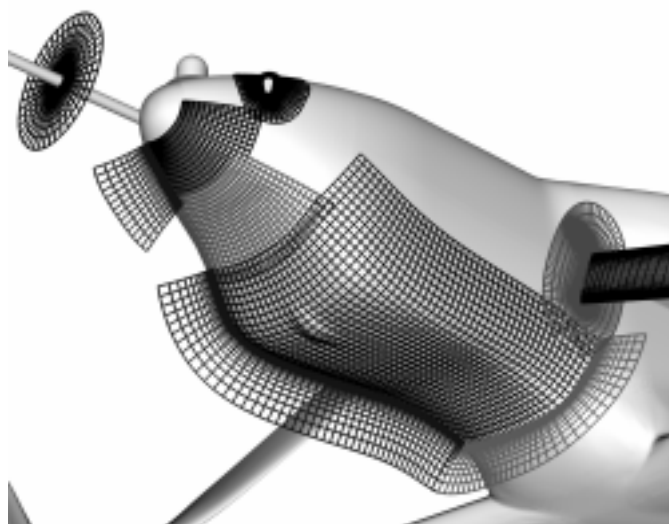


(4) 多块网格

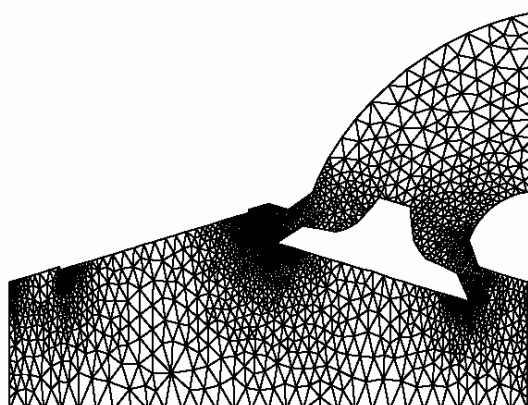


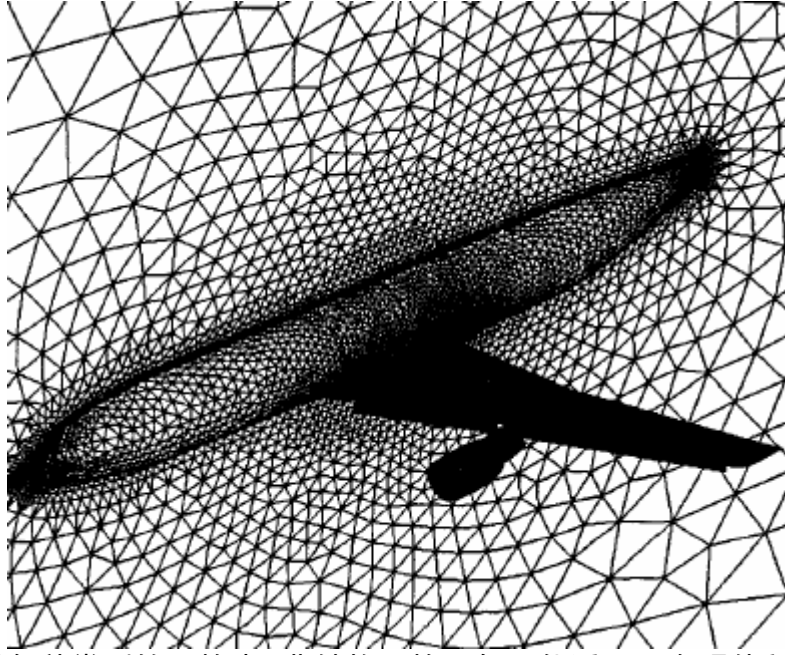
(5) 重叠网格





(6) 非结构网格





在上述各种类型的网格中,非结构网格一般只能适用于有限体积或有限元方法,其他类型的网格通称结构网格,可以适用于有限差分、有限体积或有限元方法。本书中只讨论结构网格下流体力学方程的求解。

在物理平面(或空间)中,贴体网格一般是非均匀的。为了更好的模拟如边界层等流动参数变化剧烈的区域中的流动,我们往往希望这些区域的网格较密。但是,从有限差分方法的构造和实施上看,均匀网格更加简单。注意到,贴体网格可以看作由任意曲线坐标 (ξ, η) 的坐标线组成的网格,这个任意曲线坐标和直角坐标系(笛卡儿坐标系)之间应该是一一对应的。在 CFD 中,我们往往要寻找一个 (ξ, η) 和 (x, y) 之间的变换关系,

$$\begin{aligned}\xi &= \xi(x, y) \\ \eta &= \eta(x, y)\end{aligned}\quad (1)$$

使得在物理平面网格可以是非均匀的,但是在计算平面,即 (ξ, η) 平面,网格是均匀的($\Delta\xi = \text{const}$, $\Delta\eta = \text{const}$)。如果我们知道了这一变换关系,流体力学方程可以在计算平面中,用矩形区域均匀网格下的有限差分方法求解。显然,这将简化数值计算方法的构造和计算程序的编制。

下面简单的介绍一下变换关系(1)式的构造过程。这个过程,实际上也是网格生成的过程。一般的,从数值计算的角度,我们无需知道(1)的解析表达式,只要知道离散的对对应关系即可。以图 2,图 4 所示的 O 型网格为例: 1) 任意给定 $\Delta\xi$, $\Delta\eta$, ξ_{\min} 和 η_{\min} ,并给定 ξ, η 方向的网格点数 $M_x + 1, M_y + 1$ 。则在 (ξ, η) 平面,网格点的坐标为

$$\begin{aligned}\xi_i &= \xi_{\min} + i\Delta\xi, \quad i = 0, 1, \dots, M_x \\ \eta_j &= \eta_{\min} + j\Delta\eta, \quad j = 0, 1, \dots, M_y\end{aligned}\quad (2)$$

由此得 $\xi_{\max} = \xi_{\min} + M_x \Delta \xi$, $\eta_{\max} = \eta_{\min} + M_y \Delta \eta$ 。这样,我们就得到了计算平面 (ξ, η) 上的网格形状,它是矩形区域的均匀网格。2) 画出物理平面求解域的内外边界(图2中的粗实线)和割线边界(图2中的虚线)。3) 建立计算平面求解域边界和物理平面求解域边界的对应关系,即翼型表面对应 $\eta = \eta_{\min}$, 远场边界对应 $\eta = \eta_{\max}$, 割线边界对应 ξ_{\min} 和 ξ_{\max} 。4) 在物理平面求解域的边界上划分边界网格点,定出边界网格点的坐标,并建立和计算平面边界网格点的一一对应关系:

$$\begin{aligned} (\xi_i, \eta_{\min}) &\Leftrightarrow (x_{i,0}, y_{i,0}) \quad (i = 0, 1, \dots, M_x) \\ (\xi_i, \eta_{\max}) &\Leftrightarrow (x_{i,M_y}, y_{i,M_y}) \quad (i = 0, 1, \dots, M_x) \\ (\xi_{\min}, \eta_j) &\Leftrightarrow (x_{0,j}, y_{0,j}) \quad (j = 0, 1, \dots, M_y) \\ (\xi_{\max}, \eta_j) &\Leftrightarrow (x_{M_x,j}, y_{M_x,j}) \quad (j = 0, 1, \dots, M_y) \end{aligned} \quad (3)$$

物理平面求解域的内外边界和割线边界上的网格点是我们根据流场特征而给定的,它们可能有一定任意性,但必须满足下面的要求: $(x_{i,0}, y_{i,0})$ ($i = 0, 1, \dots, M_x$) 在翼型表面上; (x_{i,M_y}, y_{i,M_y}) ($i = 0, 1, \dots, M_x$) 在远场边界上; $(x_{0,j}, y_{0,j})$ 和 $(x_{M_x,j}, y_{M_x,j})$ ($j = 0, 1, \dots, M_y$) 在割线边界上,且 $(x_{0,j}, y_{0,j}) = (x_{M_x,j}, y_{M_x,j})$ ($j = 0, 1, \dots, M_y$)。5) 通过某种方法确定物理平面求解域的内点网格 $(x_{i,j}, y_{i,j})$ ($i = 1, \dots, M_x - 1, j = 1, \dots, M_y - 1$), 且它们和计算平面上求解域内点网格的对应关系为

$$(\xi_i, \eta_j) \Leftrightarrow (x_{i,j}, y_{i,j}) \quad (i = 1, \dots, M_x - 1, j = 1, \dots, M_y - 1) \quad (4)$$

我们将在§3 贴体网格生成方法中具体介绍如何在物理平面上通过求解域边界的网格划分确定内点网格的划分。现在,我们只需知道,如果边界和内点网格已经确定,则(3) (4)式给出了(1)式中的变换关系的离散形式。由于这种变换关系是一一对应的,(1)式存在逆变换:

$$\begin{aligned} x &= x(\xi, \eta) \\ y &= y(\xi, \eta) \end{aligned} \quad (5)$$

(3) (4)式实际上也给出了逆变换的离散形式。

§2 贴体坐标中的基本方程

流体力学方程组需要在计算平面 (ξ, η) 中求解,所以,我们必须确定流体力

学方程在计算平面中的形式。上节的 (1) 及 (5) 式给出了 (x, y) 到 (ξ, η) 的变换及其逆变换，为了方便，我们把这些关系列在下面：

$$\begin{aligned}\xi &= \xi(x, y) \\ \eta &= \eta(x, y)\end{aligned}\quad (1)$$

$$\begin{aligned}x &= x(\xi, \eta) \\ y &= y(\xi, \eta)\end{aligned}\quad (2)$$

一、导数的变换

对于一阶偏导数，根据链式求导法则，有

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \xi_x + \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \eta_x \quad (3)$$

同理可得

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \xi_y + \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \eta_y \quad (4)$$

对于二阶偏导数，有

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi} \xi_x + \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \eta_x \right) \\ &= \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \xi_{xx} + \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \eta_{xx} + \xi_x \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right) + \eta_x \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) \\ &= \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \xi_{xx} + \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \eta_{xx} + \xi_x \left[\frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} \xi_x + \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi \partial \eta} \eta_x \right] + \eta_x \left[\frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi \partial \eta} \xi_x + \frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} \eta_x \right] \\ &= \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \xi_{xx} + \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \eta_{xx} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} (\xi_x)^2 + 2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi \partial \eta} \xi_x \eta_x + \frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} (\eta_x)^2\end{aligned}$$

同理可得

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} &= \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \xi_{yy} + \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \eta_{yy} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} (\xi_y)^2 + 2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi \partial \eta} \xi_y \eta_y + \frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} (\eta_y)^2, \\ \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} &= \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \xi_{xy} + \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \eta_{xy} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} \xi_x \xi_y + \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi \partial \eta} (\xi_x \eta_y + \xi_y \eta_x) + \frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} \eta_x \eta_y.\end{aligned}$$

把导数的变换关系代入微分方程，就可以得到微分方程在计算平面中的形式。以直角坐标系中的 Laplace 方程

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0$$

为例，把上述二阶导数的变换关系代入上述 Laplace 方程，得

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} [(\xi_x)^2 + (\xi_y)^2] + 2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi \partial \eta} [\xi_x \eta_x + \xi_y \eta_y] + \frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} [(\eta_x)^2 + (\eta_y)^2] \\ & + \frac{\partial \phi}{\partial \xi} (\xi_{xx} + \xi_{yy}) + \frac{\partial \phi}{\partial \eta} (\eta_{xx} + \eta_{yy}) = 0 \end{aligned} \quad (5)$$

二、度量系数及其计算方法

在导数的坐标变换公式中涉及到下列坐标变换系数： $\xi_x, \xi_y, \eta_x, \eta_y$ 。这些系数称为坐标变换公式 (1) 对应的度量系数 (metrics)。我们看到，为了求解计算平面中的偏微分方程，如 (5) 式，必须确定度量系数（有时还包括 $\xi_{xx}, \xi_{xy}, \xi_{yy}, \eta_{xx}, \eta_{xy}, \eta_{yy}$ 等）的离散值。那么，这些度量系数如何计算呢？由于一般情况下，我们只知道坐标变换关系 (1) 及 (2) 的离散表达式，度量系数一般也要通过有限差分方法近似计算。但是，直接构造 $\xi_x, \xi_y, \eta_x, \eta_y$ 的差分近似是不容易的。

以 ξ_x 为例，根据偏导数的意义， ξ_x 为 y 保持不变时 ξ 随 x 的变化，如图 1 所示，

网格点 P 处的 ξ_x 的计算公式应为：

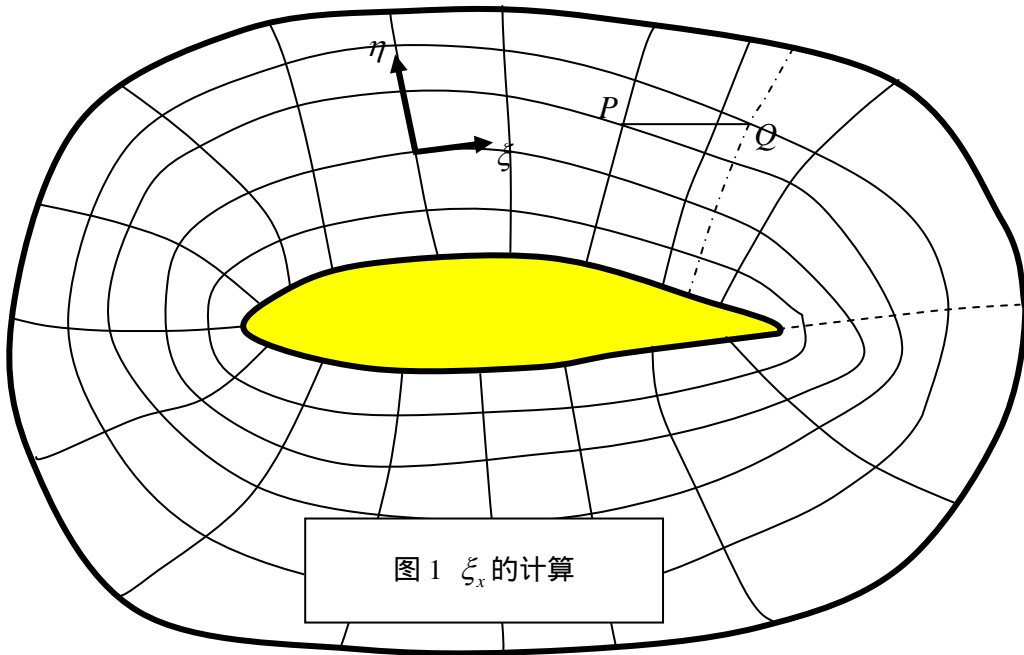


图 1 ξ_x 的计算

$$(\xi_x)_P = \frac{\xi_Q - \xi_P}{x_Q - x_P}。$$

由于 Q 一般不是网格点，因此 x_Q, ξ_Q 是未知的，只能通过插值方法确定。

另一方面，我们可以定义逆变换 (2) 式的度量系数 $x_\xi, x_\eta, y_\xi, y_\eta$ 。在贴体坐

标系中，这些度量系数的有限差分离散非常简单。如果采用中心差分离散，有

$$\begin{aligned}x_{\xi})_{i,j} &= \frac{x_{i+1,j} - x_{i-1,j}}{2\Delta\xi} \\x_{\eta})_{i,j} &= \frac{x_{i,j+1} - x_{i,j-1}}{2\Delta\eta} \\y_{\xi})_{i,j} &= \frac{y_{i+1,j} - y_{i-1,j}}{2\Delta\xi} \\y_{\eta})_{i,j} &= \frac{y_{i,j+1} - y_{i,j-1}}{2\Delta\eta}\end{aligned} \quad (6)$$

这就提示我们，如果能够找到 $\xi_x, \xi_y, \eta_x, \eta_y$ 和 $x_{\xi}, x_{\eta}, y_{\xi}, y_{\eta}$ 之间的关系，我们就可以得到 $\xi_x, \xi_y, \eta_x, \eta_y$ 等的计算方法。下面，我们推导二者之间的关系。

由变换关系 (1) 式，有

$$\begin{aligned}d\xi &= \xi_x dx + \xi_y dy \\d\eta &= \eta_x dx + \eta_y dy\end{aligned}$$

写成矩阵形式

$$\begin{bmatrix} d\xi \\ d\eta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \xi_x & \xi_y \\ \eta_x & \eta_y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dx \\ dy \end{bmatrix} \quad (7)$$

由逆变换 (2) 式，有

$$\begin{bmatrix} dx \\ dy \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{\xi} & x_{\eta} \\ y_{\xi} & y_{\eta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d\xi \\ d\eta \end{bmatrix} \quad (8)$$

(7) 及 (8) 式中的矩阵称为正变换和逆变换的 Jacobi 矩阵。由 (7) 及 (8) 易知

$$\begin{bmatrix} \xi_x & \xi_y \\ \eta_x & \eta_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{\xi} & x_{\eta} \\ y_{\xi} & y_{\eta} \end{bmatrix}^{-1}, \quad (9)$$

即

$$\begin{bmatrix} \xi_x & \xi_y \\ \eta_x & \eta_y \end{bmatrix} = \frac{1}{J} \begin{bmatrix} y_{\eta} & -x_{\eta} \\ -y_{\xi} & x_{\xi} \end{bmatrix}, \quad (10)$$

其中

$$J = \begin{vmatrix} x_{\xi} & x_{\eta} \\ y_{\xi} & y_{\eta} \end{vmatrix} = x_{\xi} y_{\eta} - x_{\eta} y_{\xi} = \begin{vmatrix} \xi_x & \xi_y \\ \eta_x & \eta_y \end{vmatrix}^{-1} \quad (11)$$

为坐标变换的 Jacobi 行列式 (jacobian)。因此，

$$\begin{aligned}
\xi_x &= \frac{1}{J} y_\eta \\
\eta_x &= -\frac{1}{J} y_\xi \\
\xi_y &= -\frac{1}{J} x_\eta \\
\eta_y &= \frac{1}{J} x_\xi
\end{aligned} \quad (12)$$

根据 (6) (11) (12) 式, 可以得到 $\xi_x, \xi_y, \eta_x, \eta_y$ 的差分离散形式。

如何计算 $\xi_{xx}, \xi_{xy}, \xi_{yy}, \eta_{xx}, \eta_{xy}, \eta_{yy}$ 呢? 考虑

$$\begin{aligned}
\xi_\xi &= \xi_x x_\xi + \xi_y y_\xi = 1 \\
\xi_\eta &= \xi_x x_\eta + \xi_y y_\eta = 0
\end{aligned} \quad (13)$$

根据 (13) 式, 我们同样可以得到

$$\begin{aligned}
\xi_x &= \frac{1}{J} y_\eta \\
\xi_y &= -\frac{1}{J} x_\eta
\end{aligned}$$

现在, 把 (13) 式分别对 ξ, η 求导:

$$\begin{aligned}
(\xi_x x_\xi + \xi_y y_\xi)_\xi &= (\xi_x)_\xi x_\xi + (\xi_y)_\xi y_\xi + \xi_x x_{\xi\xi} + \xi_y y_{\xi\xi} \\
&= (\xi_{xx} x_\xi + \xi_{xy} y_\xi) x_\xi + (\xi_{xy} x_\xi + \xi_{yy} y_\xi) y_\xi + \xi_x x_{\xi\xi} + \xi_y y_{\xi\xi} \\
&= \xi_{xx} (x_\xi)^2 + 2\xi_{xy} x_\xi y_\xi + \xi_{yy} (y_\xi)^2 + \xi_x x_{\xi\xi} + \xi_y y_{\xi\xi} \\
&= 0 \\
(\xi_x x_\xi + \xi_y y_\xi)_\eta &= (\xi_x)_\eta x_\xi + (\xi_y)_\eta y_\xi + \xi_x x_{\xi\eta} + \xi_y y_{\xi\eta} \\
&= (\xi_{xx} x_\eta + \xi_{xy} y_\eta) x_\xi + (\xi_{xy} x_\eta + \xi_{yy} y_\eta) y_\xi + \xi_x x_{\xi\eta} + \xi_y y_{\xi\eta} \\
&= \xi_{xx} x_\xi x_\eta + \xi_{xy} (x_\xi y_\eta + x_\eta y_\xi) + \xi_{yy} y_\xi y_\eta + \xi_x x_{\xi\eta} + \xi_y y_{\xi\eta} \\
&= 0 \\
(\xi_x x_\eta + \xi_y y_\eta)_\xi &= (\xi_x)_\xi x_\eta + (\xi_y)_\xi y_\eta + \xi_x x_{\xi\eta} + \xi_y y_{\xi\eta} \\
&= (\xi_{xx} x_\xi + \xi_{xy} y_\xi) x_\eta + (\xi_{xy} x_\xi + \xi_{yy} y_\xi) y_\eta + \xi_x x_{\xi\eta} + \xi_y y_{\xi\eta} \\
&= \xi_{xx} x_\xi x_\eta + \xi_{xy} (x_\xi y_\eta + x_\eta y_\xi) + \xi_{yy} y_\xi y_\eta + \xi_x x_{\xi\eta} + \xi_y y_{\xi\eta} \\
&= 0 \\
(\xi_x x_\eta + \xi_y y_\eta)_\eta &= (\xi_x)_\eta x_\eta + (\xi_y)_\eta y_\eta + \xi_x x_{\eta\eta} + \xi_y y_{\eta\eta} \\
&= (\xi_{xx} x_\eta + \xi_{xy} y_\eta) x_\eta + (\xi_{xy} x_\eta + \xi_{yy} y_\eta) y_\eta + \xi_x x_{\eta\eta} + \xi_y y_{\eta\eta} \\
&= \xi_{xx} (x_\eta)^2 + 2\xi_{xy} x_\eta y_\eta + \xi_{yy} (y_\eta)^2 + \xi_x x_{\eta\eta} + \xi_y y_{\eta\eta} \\
&= 0
\end{aligned}$$

上面四个关系中，只有三个是独立的，写成矩阵形式，有：

$$\begin{bmatrix} (x_\xi)^2 & 2x_\xi y_\xi & (y_\xi)^2 \\ x_\xi x_\eta & (x_\xi y_\eta + x_\eta y_\xi) & y_\xi y_\eta \\ (x_\eta)^2 & 2x_\eta y_\eta & (y_\eta)^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi_{xx} \\ \xi_{xy} \\ \xi_{yy} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \xi_x x_{\xi\xi} + \xi_y y_{\xi\xi} \\ \xi_x x_{\xi\eta} + \xi_y y_{\xi\eta} \\ \xi_x x_{\eta\eta} + \xi_y y_{\eta\eta} \end{bmatrix} \quad (14)$$

所以

$$\begin{bmatrix} \xi_{xx} \\ \xi_{xy} \\ \xi_{yy} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} (x_\xi)^2 & 2x_\xi y_\xi & (y_\xi)^2 \\ x_\xi x_\eta & (x_\xi y_\eta + x_\eta y_\xi) & y_\xi y_\eta \\ (x_\eta)^2 & 2x_\eta y_\eta & (y_\eta)^2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \xi_x x_{\xi\xi} + \xi_y y_{\xi\xi} \\ \xi_x x_{\xi\eta} + \xi_y y_{\xi\eta} \\ \xi_x x_{\eta\eta} + \xi_y y_{\eta\eta} \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} \xi_{xx} \\ \xi_{xy} \\ \xi_{yy} \end{bmatrix} = \frac{-1}{J[(x_\xi y_\eta)^2 + (x_\eta y_\xi)^2]} \begin{bmatrix} J(y_\eta)^2 & -2Jy_\xi y_\eta & J(y_\xi)^2 \\ -Jx_\eta y_\eta & J(x_\xi y_\eta + x_\eta y_\xi) & -Jx_\xi y_\xi \\ J(x_\eta)^2 & -2Jx_\xi x_\eta & J(x_\xi)^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi_x x_{\xi\xi} + \xi_y y_{\xi\xi} \\ \xi_x x_{\xi\eta} + \xi_y y_{\xi\eta} \\ \xi_x x_{\eta\eta} + \xi_y y_{\eta\eta} \end{bmatrix} \quad (15)$$

同理

$$\begin{bmatrix} \eta_{xx} \\ \eta_{xy} \\ \eta_{yy} \end{bmatrix} = \frac{-1}{J[(x_\xi y_\eta)^2 + (x_\eta y_\xi)^2]} \begin{bmatrix} J(y_\eta)^2 & -2Jy_\xi y_\eta & J(y_\xi)^2 \\ -Jx_\eta y_\eta & J(x_\xi y_\eta + x_\eta y_\xi) & -Jx_\xi y_\xi \\ J(x_\eta)^2 & -2Jx_\xi x_\eta & J(x_\xi)^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \eta_x x_{\xi\xi} + \eta_y y_{\xi\xi} \\ \eta_x x_{\xi\eta} + \eta_y y_{\xi\eta} \\ \eta_x x_{\eta\eta} + \eta_y y_{\eta\eta} \end{bmatrix} \quad (16)$$

对 (15) (16) 式的右端进行有限差分离散，就可以算出 $\xi_{xx}, \xi_{xy}, \xi_{yy}, \eta_{xx}, \eta_{xy}, \eta_{yy}$ 。

三、任意曲线坐标系中流体力学方程组的守恒形式

考虑直角坐标系中的二维守恒型 Navier - Stokes 方程：

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial (\mathbf{F} - \mathbf{F}_1)}{\partial x} + \frac{\partial (\mathbf{G} - \mathbf{G}_1)}{\partial y} = 0. \quad (17)$$

利用一阶导数的变换公式，有

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial (\mathbf{F} - \mathbf{F}_1)}{\partial \xi} \xi_x + \frac{\partial (\mathbf{G} - \mathbf{G}_1)}{\partial \xi} \xi_y + \frac{\partial (\mathbf{F} - \mathbf{F}_1)}{\partial \eta} \eta_x + \frac{\partial (\mathbf{G} - \mathbf{G}_1)}{\partial \eta} \eta_y = 0. \quad (18)$$

(18) 式称为 (ξ, η) 平面上 Navier - Stokes 方程的弱守恒形式。在 (18) 式两侧乘以 Jacobian J ，有

$$J \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + J \frac{\partial (\mathbf{F} - \mathbf{F}_1)}{\partial \xi} \xi_x + J \frac{\partial (\mathbf{G} - \mathbf{G}_1)}{\partial \xi} \xi_y + J \frac{\partial (\mathbf{F} - \mathbf{F}_1)}{\partial \eta} \eta_x + J \frac{\partial (\mathbf{G} - \mathbf{G}_1)}{\partial \eta} \eta_y = 0.$$

上面的方程中的各项可以进一步整理：

$$\begin{aligned}
J \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} &= \frac{\partial (J\mathbf{U})}{\partial t} \\
J \frac{\partial (\mathbf{F} - \mathbf{F}_1)}{\partial \xi} \xi_x + J \frac{\partial (\mathbf{G} - \mathbf{G}_1)}{\partial \xi} \xi_y &= \frac{\partial}{\partial \xi} \{ J[(\mathbf{F} - \mathbf{F}_1)\xi_x + (\mathbf{G} - \mathbf{G}_1)\xi_y] \} \\
&\quad - (\mathbf{F} - \mathbf{F}_1) \frac{\partial}{\partial \xi} (J\xi_x) - (\mathbf{G} - \mathbf{G}_1) \frac{\partial}{\partial \xi} (J\xi_y) \\
J \frac{\partial (\mathbf{F} - \mathbf{F}_1)}{\partial \eta} \eta_x + J \frac{\partial (\mathbf{G} - \mathbf{G}_1)}{\partial \eta} \eta_y &= \frac{\partial}{\partial \eta} \{ J[(\mathbf{F} - \mathbf{F}_1)\eta_x + (\mathbf{G} - \mathbf{G}_1)\eta_y] \} \\
&\quad - (\mathbf{F} - \mathbf{F}_1) \frac{\partial}{\partial \eta} (J\eta_x) - (\mathbf{G} - \mathbf{G}_1) \frac{\partial}{\partial \eta} (J\eta_y),
\end{aligned}$$

得

$$\begin{aligned}
\frac{\partial (J\mathbf{U})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \xi} \{ J[(\mathbf{F} - \mathbf{F}_1)\xi_x + (\mathbf{G} - \mathbf{G}_1)\xi_y] \} + \frac{\partial}{\partial \eta} \{ J[(\mathbf{F} - \mathbf{F}_1)\eta_x + (\mathbf{G} - \mathbf{G}_1)\eta_y] \} \\
- (\mathbf{F} - \mathbf{F}_1) \left[\frac{\partial}{\partial \xi} (J\xi_x) + \frac{\partial}{\partial \eta} (J\eta_x) \right] - (\mathbf{G} - \mathbf{G}_1) \left[\frac{\partial}{\partial \xi} (J\xi_y) + \frac{\partial}{\partial \eta} (J\eta_y) \right] = 0
\end{aligned} \quad (19)$$

注意到

$$\begin{aligned}
\left[\frac{\partial}{\partial \xi} (J\xi_x) + \frac{\partial}{\partial \eta} (J\eta_x) \right] &= \frac{\partial}{\partial \xi} (y_\eta) + \frac{\partial}{\partial \eta} (-y_\xi) = 0 \\
\left[\frac{\partial}{\partial \xi} (J\xi_y) + \frac{\partial}{\partial \eta} (J\eta_y) \right] &= \frac{\partial}{\partial \xi} (-x_\eta) + \frac{\partial}{\partial \eta} (x_\xi) = 0
\end{aligned}$$

所以, (19) 式可化简为

$$\frac{\partial (J\mathbf{U})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \xi} \{ J[(\mathbf{F} - \mathbf{F}_1)\xi_x + (\mathbf{G} - \mathbf{G}_1)\xi_y] \} + \frac{\partial}{\partial \eta} \{ J[(\mathbf{F} - \mathbf{F}_1)\eta_x + (\mathbf{G} - \mathbf{G}_1)\eta_y] \} = 0. \quad (20)$$

(20) 式称为 (ξ, η) 平面上 Navier - Stokes 方程的强守恒形式, 一般记为:

$$\frac{\partial (\widehat{\mathbf{U}})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \xi} (\widehat{\mathbf{F}} - \widehat{\mathbf{F}}_1) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\widehat{\mathbf{G}} - \widehat{\mathbf{G}}_1) = 0, \quad (21)$$

其中

$$\begin{aligned}
\widehat{\mathbf{U}} &= J\mathbf{U} \\
\widehat{\mathbf{F}} &= J[\mathbf{F}\xi_x + \mathbf{G}\xi_y] \\
\widehat{\mathbf{G}} &= J[\mathbf{F}\eta_x + \mathbf{G}\eta_y] \quad (22) \\
\widehat{\mathbf{F}}_1 &= J[\mathbf{F}_1\xi_x + \mathbf{G}_1\xi_y] \\
\widehat{\mathbf{G}}_1 &= J[\mathbf{F}_1\eta_x + \mathbf{G}_1\eta_y]
\end{aligned}$$

§3 贴体网格生成方法

在物理平面生成贴体网格并建立和计算平面矩形网格的对应关系的过程称为网格生成。我们回顾一下§1 中介绍过的网格生成的过程：

1) 任意给定 $\Delta\xi$, $\Delta\eta$, ξ_{\min} 和 η_{\min} , 并给定 ξ, η 方向的网格点数 $M_x + 1, M_y + 1$ 。

则在 (ξ, η) 平面, 网格点的坐标为

$$\begin{aligned}\xi_i &= \xi_{\min} + i\Delta\xi, \quad i = 0, 1, \dots, M_x \\ \eta_j &= \eta_{\min} + j\Delta\eta, \quad j = 0, 1, \dots, M_y\end{aligned}$$

由此得 $\xi_{\max} = \xi_{\min} + M_x\Delta\xi, \eta_{\max} = \eta_{\min} + M_y\Delta\eta$ 。这样, 我们就得到了计算平面 (ξ, η)

上的网格形状, 它是矩形区域的均匀网格。2) 画出物理平面求解域的边界。3) 建立计算平面求解域边界和物理平面求解域边界的对应关系。4) 在物理平面求解域的边界上划分边界网格点, 并建立和计算平面边界网格点的一一对应关系：

$$\begin{aligned}(\xi_i, \eta_{\min}) &\Leftrightarrow (x_{i,0}, y_{i,0}) \quad (i = 0, 1, \dots, M_x) \\ (\xi_i, \eta_{\max}) &\Leftrightarrow (x_{i,M_y}, y_{i,M_y}) \quad (i = 0, 1, \dots, M_x) \\ (\xi_{\min}, \eta_j) &\Leftrightarrow (x_{0,j}, y_{0,j}) \quad (j = 0, 1, \dots, M_y) \\ (\xi_{\max}, \eta_j) &\Leftrightarrow (x_{M_x,j}, y_{M_x,j}) \quad (j = 0, 1, \dots, M_y)\end{aligned}$$

5) 通过某种方法确定物理平面求解域的内点网格 $(x_{i,j}, y_{i,j})$,

$(i = 1, \dots, M_x - 1, j = 1, \dots, M_y - 1)$ 且它们和计算平面上求解域内点网格的对应关系为

$$(\xi_i, \eta_j) \Leftrightarrow (x_{i,j}, y_{i,j}) \quad (i = 1, \dots, M_x - 1, j = 1, \dots, M_y - 1)。$$

这样, 我们就得到了贴体网格, 它在离散意义下对应着如下坐标变换关系：

$$\begin{aligned}\xi &= \xi(x, y) \\ \eta &= \eta(x, y)\end{aligned} \quad (1)$$

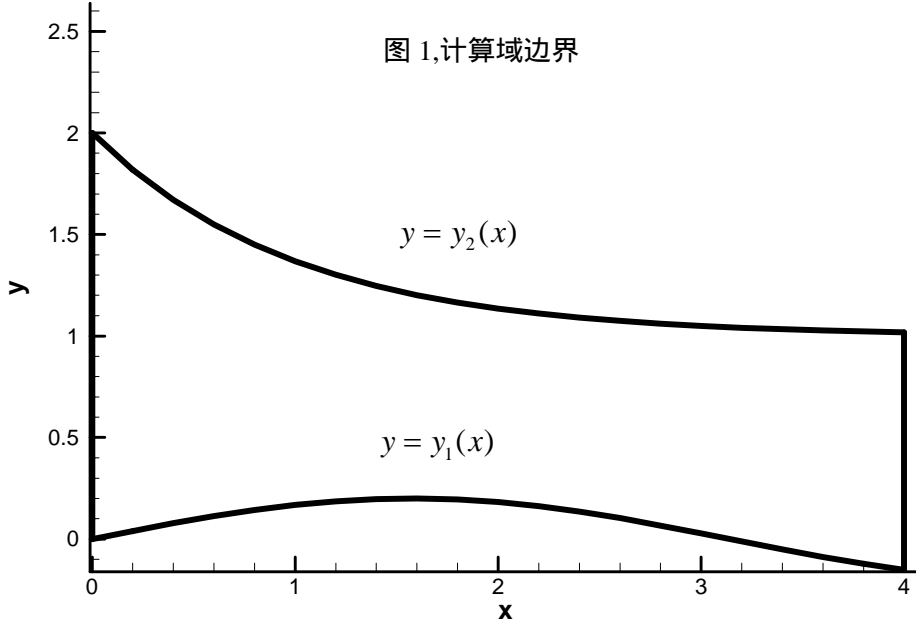
$$\begin{aligned}x &= x(\xi, \eta) \\ y &= y(\xi, \eta)\end{aligned} \quad (2)$$

下面我们具体介绍两种简单的网格生成方法。

一、代数网格生成方法

所谓代数网格生成方法, 是通过给定 (1) 或 (2) 的代数形式来生成网格。

考虑下面的由 $x=0, x=4, y=y_1(x), y=y_2(x)$ 围成的区域。我们可以定义下面的变换关系：



$$\begin{aligned}\xi &= x \\ \eta &= \frac{y - y_1(x)}{y_2(x) - y_1(x)}\end{aligned}\quad (3)$$

此时，计算平面和物理平面的对应关系为：

$$\begin{aligned}\xi &= \xi_{\min} \Leftrightarrow x = 0 \\ \xi &= \xi_{\max} \Leftrightarrow x = 4 \\ \eta &= \eta_{\min} \Leftrightarrow y = y_1(x) \\ \eta &= \eta_{\max} \Leftrightarrow y = y_2(x)\end{aligned}$$

且 $\xi_{\max} = 4, \xi_{\min} = 0, \eta_{\max} = 1, \eta_{\min} = 0$ 。设 ξ, η 方向的网格点数 $M_x + 1, M_y + 1$ 。则在

(ξ, η) 平面，网格点的坐标为

$$\begin{aligned}\xi_i &= \xi_{\min} + i\Delta\xi, \quad i = 0, 1, \dots, M_x \\ \eta_j &= \eta_{\min} + j\Delta\eta, \quad j = 0, 1, \dots, M_y \\ \Delta\xi &= \frac{\xi_{\max} - \xi_{\min}}{M_x}, \quad \Delta\eta = \frac{\eta_{\max} - \eta_{\min}}{M_y}\end{aligned}\quad (4)$$

根据 (3) 式，

$$\begin{aligned}x_{i,j} &= \xi_i \\ y_{i,j} &= y_1(x_{i,j}) + \eta_j(y_2(x_{i,j}) - y_1(x_{i,j}))\end{aligned}\quad (5)$$

这样，我们就得到图 2 所示贴体网格：

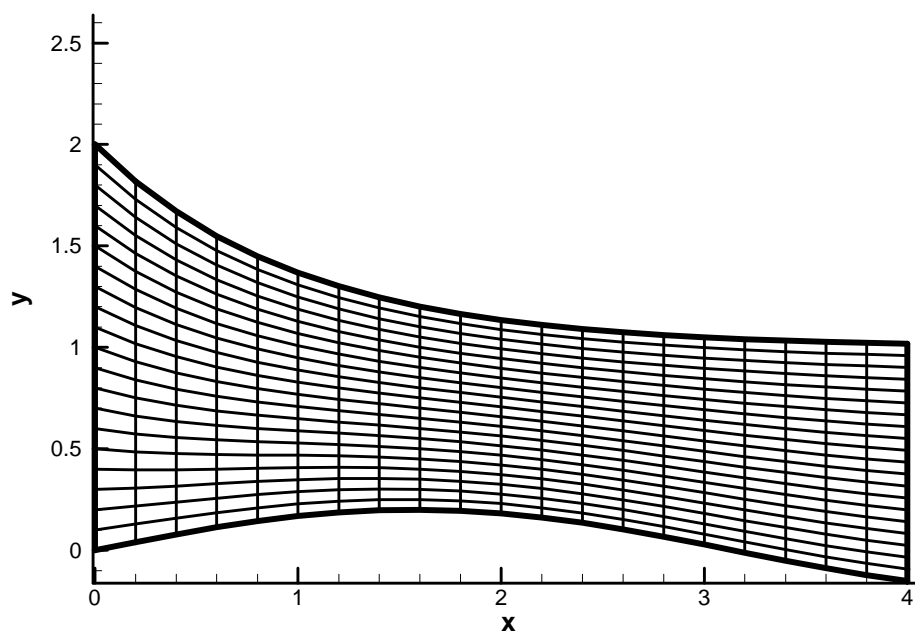


图 2 贴体网格

如果我們希望在下边界 $y = y_1(x)$ 附近物理平面网格加密，则可定义如下变换关系：

$$\begin{aligned} \xi &= x \\ \frac{e^{\alpha\eta} - 1}{e^{\alpha} - 1} &= \frac{y - y_1(x)}{y_2(x) - y_1(x)}, \quad (6) \end{aligned}$$

取 $\alpha = 1$ 重复上面的网格生成过程，可得贴体网格图 3。

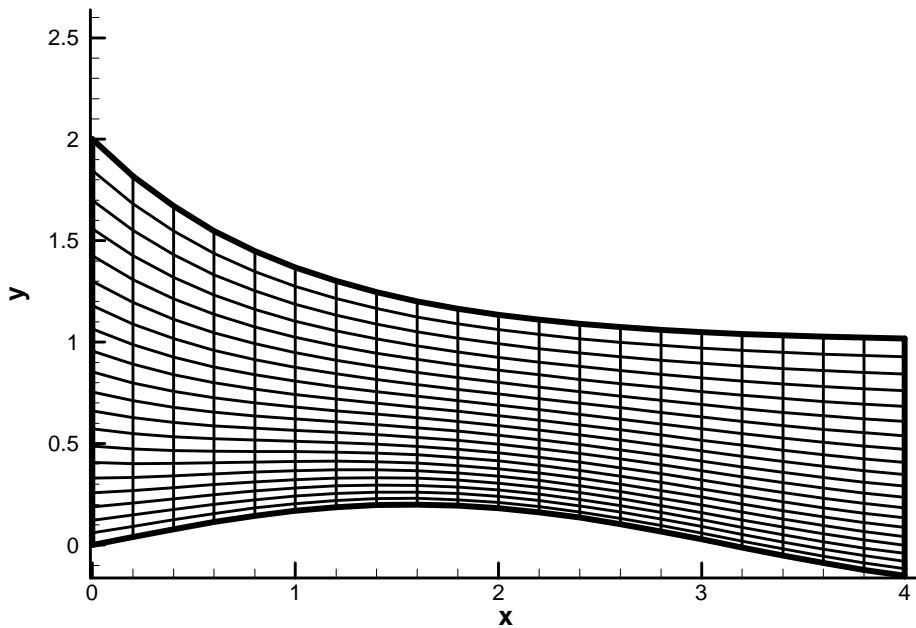


图 3 贴体网格 ($\alpha = 1$)

$\alpha = 3$ 时, 贴体网格见图 4.。

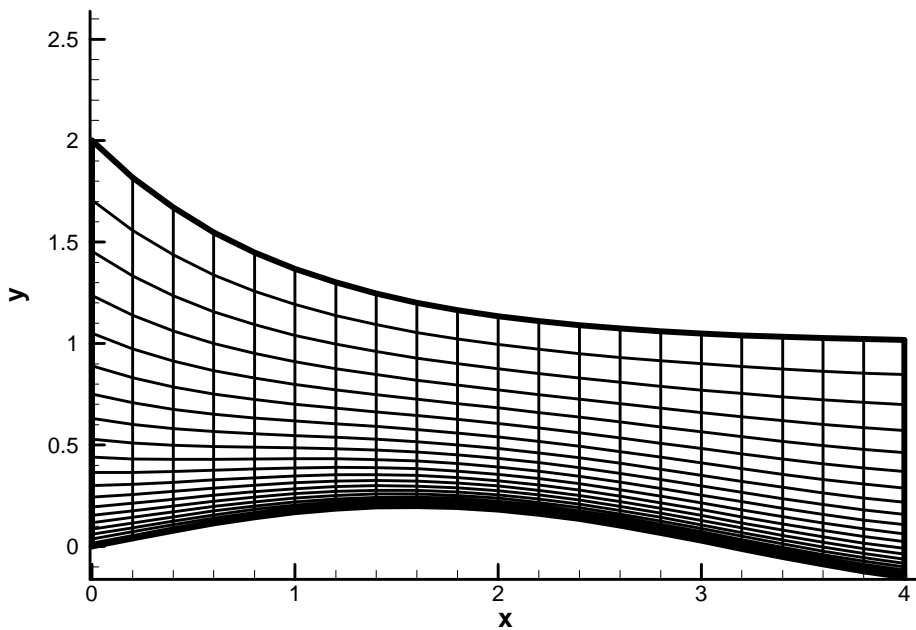


图 4 贴体网格 ($\alpha = 3$)

通过调节 α 的值, 我们可以控制 $y = y_1(x)$ 附近网格加密的程度。为了使读者有一个直观的认识, 我们把 (6) 式对应的 Fortran 程序列在下面。

代数网格生成程序:

```
program g1
  dimension x(30,30),y(30,30)
```



```

mx=20
my=20

x1=0.    !  $\xi_{\min} = x_{\min}$ 

x2=4.    !  $\xi_{\max} = x_{\max}$ 

alf=3.    !  $\alpha$ 

do i=1,mx+1
do j=1,my+1
  x(i,j)=x1+float(i-1)/float(mx)*(x2-x1)

  !  $\xi_i = x1 + \text{float}(i-1)/\text{float}(mx) * (x2-x1)$ 

end do
end do
do i=1,mx+1
do j=1,my+1

  y1=sin(x(i,j))*0.2    !  $y = y_1(x)$ 

  y2=1.+exp(-x(i,j))    !  $y = y_2(x)$ 

  yt=float(j-1)/float(my)*alf    !  $\eta_j = \text{float}(j-1)/\text{float}(my)$ 

  y(i,j)=y1+(exp(yt)-1.)*(y2-y1)/(exp(alf)-1.)
end do
end do

```

c

```

open(22,file='grid.dat') !output in Tecplot format

write(22,*) 'TITLE="grid"'
write(22,*) 'VARIABLES="x","y"'
write(22,*) 'ZONE I=',mx+1,' J=',my+1,' F=POINT'
do j=1,my+1
do i=1,mx+1
  xx1=x(i,j)
  yy1=y(i,j)
  write(22,'(2e15.6)') xx1,yy1
end do
end do
close(22)
stop
end

```

应该指出，上面给出的例子是非常简单的情况。针对更复杂的情形，(3) (6) 式中的代数关系可以为分段函数或者由某种插值方法确定的函数关系。目

前，代数网格生成方法已经发展到比较完善的程度。大部分交互式网格生成商业软件均采用代数方法作为其基本方法。代数网格生成方法的优点是方便灵活，可以较好的控制网格的分布；其缺点是通用性差，自动化程度不高，需要较多的人工干预，有时网格的质量较差。

二、基于微分方程数值解的网格生成方法

基于特殊的双曲型、抛物型和椭圆型方程均可进行网格生成。这里只介绍基于求解椭圆型方程的网格生成方法，这也是应用最为普遍的方法。

我们首先介绍网格质量的概念。第二章中讨论多维问题的差分格式时，我们采用的是直角坐标系中的矩形网格。矩形网格中两族坐标线是正交的。理论分析和数值实验均表明，在贴体坐标系中，正交网格下差分格式的计算效果要优于非正交网格。当然，在某些情况下（如图 1 所示的求解域，网格不可能完全正交，此时我们要求两族网格线的夹角尽量接近 90 度。也就是说，高质量的网格是尽量正交的网格。在上节，我们看到，度量系数一般通过有限差分方法计算，而有限差分方法要求函数是充分光滑的。所以，高质量的网格还应该是充分光滑的网格。

对于二维问题，保角变换提供了满足上述要求的一种网格生成方法。我们把物理平面和计算平面的网格写为复数的形式：

$$\begin{aligned} Z &= x + iy \\ \zeta &= \xi + i\eta \end{aligned}$$

如果 $\zeta = \zeta(Z)$ 是解析函数，则 (x, y) 到 (ξ, η) 的变换称为保角变换。保角变换的优良性质体现在 ξ, η 网格线之间的夹角等于 x, y 网格线之间的夹角（即如果 (ξ, η) 平面网格正交，则 (x, y) 平面网格也是正交的），而且变换是充分光滑的。 $\zeta = \zeta(Z)$ 是解析函数的条件是所谓 Cauchy - Riemann 条件：

$$\frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{\partial \eta}{\partial y}, \quad \frac{\partial \xi}{\partial y} = -\frac{\partial \eta}{\partial x} \quad (7)$$

保角变换方法的缺点是对一般形状的区域，构造保角变换非常复杂，而且只适用于二维问题。为了解决这些问题，注意到，由（7）式可得：

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \xi}{\partial y^2} &= 0 \\ \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \eta}{\partial y^2} &= 0 \end{aligned} \quad (8)$$

因此，我们可以用 Laplace 方程（8）式作为网格生成的出发方程。显然，在一般情况下，（8）式和（7）式不等价，所以生成的网格不一定是正交的。但由于（8）式是椭圆型方程， (x, y) 和 (ξ, η) 之间的变换是光滑的和一一对应的。

然而，直接求解 (8) 式是困难的：方程的自变量是 (x, y) ，在非矩形区域上求解该方程时也需生成网格！解决问题的方法是交换 (8) 式中的自变量和因变量。根据 §2 中的 (15) (16) 式，(8) 式可以化为：

$$\begin{aligned} \alpha x_{\xi\xi} - 2\beta x_{\xi\eta} + \gamma x_{\eta\eta} &= 0 \\ \alpha y_{\xi\xi} - 2\beta y_{\xi\eta} + \gamma y_{\eta\eta} &= 0 \end{aligned}, (9)$$

其中

$$\begin{aligned} \alpha &= (x_\eta)^2 + (y_\eta)^2 \\ \beta &= x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta \quad \circ (10) \\ \gamma &= (x_\xi)^2 + (y_\xi)^2 \end{aligned}$$

由于 (ξ, η) 平面的求解域是矩形区域，我们可以用矩形网格下的有限差分方法求解 (9) 式，从而得到和 ξ_i, η_j 对应的 $x_{i,j}, y_{i,j}$ 。

我们假定，物理平面求解域边界的网格点坐标已经确定，即

$$\begin{aligned} (x_{i,0}, y_{i,0}) \quad (i = 0, 1, \dots, M_x) \\ (x_{i,M_y}, y_{i,M_y}) \quad (i = 0, 1, \dots, M_x) \\ (x_{0,j}, y_{0,j}) \quad (j = 0, 1, \dots, M_y) \\ (x_{M_x,j}, y_{M_x,j}) \quad (j = 0, 1, \dots, M_y) \end{aligned}$$

已知。所以，只需讨论内点 (9) 式的离散。求解椭圆型方程时，所有偏导数均用中心差分离散即可。首先计算 (9) 式中方程的系数 α, β, γ ：

$$\alpha_{i,j} = \left(\frac{x_{i,j+1} - x_{i,j-1}}{\Delta \eta} \right)^2 + \left(\frac{y_{i,j+1} - y_{i,j-1}}{\Delta \eta} \right)^2,$$

$\beta_{i,j}, \gamma_{i,j}$ 可用类似方法计算。(9) 式中的二阶导数项也用中心差分离散，有

$$\begin{aligned} \alpha_{i,j} & \left(\frac{x_{i+1,j} - 2x_{i,j} + x_{i-1,j}}{\Delta \xi \Delta \xi} \right) \\ & - \beta_{i,j} \left(\frac{x_{i+1,j+1} - x_{i+1,j-1} - x_{i-1,j+1} + x_{i-1,j-1}}{2\Delta \xi \Delta \eta} \right) \quad , (11a) \\ & + \gamma_{i,j} \left(\frac{x_{i,j+1} - 2x_{i,j} + x_{i,j-1}}{\Delta \eta \Delta \eta} \right) = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \alpha_{i,j} \left(\frac{y_{i+1,j} - 2y_{i,j} + y_{i-1,j}}{\Delta\xi\Delta\xi} \right) \\
& - \beta_{i,j} \left(\frac{y_{i+1,j+1} - y_{i+1,j-1} - y_{i-1,j+1} + y_{i-1,j-1}}{2\Delta\xi\Delta\eta} \right) \quad (11b) \\
& + \gamma_{i,j} \left(\frac{y_{i,j+1} - 2y_{i,j} + y_{i,j-1}}{\Delta\eta\Delta\eta} \right) = 0
\end{aligned}$$

上式可以整理为：

$$\begin{aligned}
b_p x_{i,j} &= b_w x_{i-1,j} + b_e x_{i+1,j} + b_s x_{i,j-1} + b_n x_{i,j+1} + c_{px} \\
b_p y_{i,j} &= b_w y_{i-1,j} + b_e y_{i+1,j} + b_s y_{i,j-1} + b_n y_{i,j+1} + c_{py}
\end{aligned} \quad , \quad (12)$$

其中

$$\begin{aligned}
b_w &= b_e = \frac{\alpha_{i,j}}{\Delta\xi\Delta\xi}, \quad b_s = b_n = \frac{\gamma_{i,j}}{\Delta\eta\Delta\eta}, \quad b_p = b_w + b_e + b_s + b_n \\
c_{px} &= -\beta_{i,j} \left(\frac{x_{i+1,j+1} - x_{i+1,j-1} - x_{i-1,j+1} + x_{i-1,j-1}}{2\Delta\xi\Delta\eta} \right) \\
c_{py} &= -\beta_{i,j} \left(\frac{y_{i+1,j+1} - y_{i+1,j-1} - y_{i-1,j+1} + y_{i-1,j-1}}{2\Delta\xi\Delta\eta} \right)
\end{aligned}$$

当物理平面求解域边界的网格点坐标已经确定时，(12)式是封闭的，可以解出 $x_{i,j}, y_{i,j}$ 。由于(12)式是一个非线性方程，我们只能用迭代法求解：首先给定边界网格坐标（已知量），并给出内点网格坐标的初始估计值，如

$$\begin{aligned}
x_{i,j}^{(0)} &= 0, \quad y_{i,j}^{(0)} = 0 \\
i &= 1, 2, \dots, M_x - 1 \\
j &= 1, 2, \dots, M_y - 1
\end{aligned}$$

根据(12)式，可以算出 $x_{i,j}, y_{i,j}$ 的第一次迭代值：

$$\begin{aligned}
x_{i,j}^{(1)} &= (b_w^{(0)} x_{i-1,j}^{(0)} + b_e^{(0)} x_{i+1,j}^{(0)} + b_s^{(0)} x_{i,j-1}^{(0)} + b_n^{(0)} x_{i,j+1}^{(0)} + c_{px}^{(0)}) / b_p^{(0)} \\
y_{i,j}^{(1)} &= (b_w^{(0)} y_{i-1,j}^{(0)} + b_e^{(0)} y_{i+1,j}^{(0)} + b_s^{(0)} y_{i,j-1}^{(0)} + b_n^{(0)} y_{i,j+1}^{(0)} + c_{py}^{(0)}) / b_p^{(0)} \\
i &= 1, 2, \dots, M_x - 1, \quad j = 1, 2, \dots, M_y - 1
\end{aligned}$$

依此类推，一般的有

$$\begin{aligned}
x_{i,j}^{(k+1)} &= (b_w^{(k)} x_{i-1,j}^{(k)} + b_e^{(k)} x_{i+1,j}^{(k)} + b_s^{(k)} x_{i,j-1}^{(k)} + b_n^{(k)} x_{i,j+1}^{(k)} + c_{px}^{(k)}) / b_p^{(k)} \\
y_{i,j}^{(k+1)} &= (b_w^{(k)} y_{i-1,j}^{(k)} + b_e^{(k)} y_{i+1,j}^{(k)} + b_s^{(k)} y_{i,j-1}^{(k)} + b_n^{(k)} y_{i,j+1}^{(k)} + c_{py}^{(k)}) / b_p^{(k)} \\
i &= 1, 2, \dots, M_x - 1, \quad j = 1, 2, \dots, M_y - 1
\end{aligned}$$

其中 $x_{i,j}^{(k)}, y_{i,j}^{(k)}$ 称为 $x_{i,j}, y_{i,j}$ 的第 k 次迭代值。当 $\max(\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|, \|y^{(k+1)} - y^{(k)}\|) \leq \varepsilon$ （ ε 为给定的小正数）时，我们认为迭代收敛，这样就得到了贴体网格。

采用(8)或(9)式进行网格生成的问题是求解域内的网格分布完全由边界处网格分布决定,缺少对于求解域内部的控制机制。所以,在实用中,我们把(8)式修正为 Poission 方程

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \xi}{\partial y^2} &= P(x, y) \\ \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \eta}{\partial y^2} &= Q(x, y)\end{aligned}$$

通过指定合适的源项 P, Q 来控制网格的分布。具体做法可参看有关网格生成的书籍,这里从略。

求解椭圆型方程生成贴体网格方法的优点是网格正交性和光滑性较好,网格生成的自动化程度较高;缺点是比较复杂,计算量较大。在商业网格生成软件中,通常用代数方法生成一个初始网格,然后用求解椭圆型方程的办法改进网格的质量。

第四章 可压缩流动的数值方法(1):

实例分析

本章通过二维翼型无粘绕流的例子介绍用有限差分方法求解流体力学 Euler 方程的过程。本章的特点是,我们采用任意曲线坐标系中的 Euler 方程来进行非矩形区域内流动的数值模拟。这个过程虽然比采用直角坐标系中的 Euler 方程模拟矩形区域内的流动更为复杂,但更具有一般意义。我们希望,通过本章,读者可以对有限差分方法实施的过程和应注意的一些问题有初步的认识。

§1 控制方程和问题描述

一、守恒型 Euler 方程

在任意曲线坐标系中,守恒型 Euler 方程为:

$$\frac{\partial(\hat{\mathbf{U}})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \xi}(\hat{\mathbf{F}}) + \frac{\partial}{\partial \eta}(\hat{\mathbf{G}}) = 0, \quad (1)$$

其中

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{U}} &= J\mathbf{U} \\ \hat{\mathbf{F}} &= J[\mathbf{F}\xi_x + \mathbf{G}\xi_y] \quad , \quad (2) \\ \hat{\mathbf{G}} &= J[\mathbf{F}\eta_x + \mathbf{G}\eta_y]\end{aligned}$$

且

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho E \end{pmatrix} \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (\rho E + p)u \end{pmatrix} \quad \mathbf{G} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho vu \\ \rho v^2 + p \\ (\rho E + p)v \end{pmatrix}。$$

(1) 式可以改写为拟线性的形式：

$$\frac{\partial(\hat{\mathbf{U}})}{\partial t} + \hat{A} \frac{\partial}{\partial \xi}(\hat{\mathbf{U}}) + \hat{B} \frac{\partial}{\partial \eta}(\hat{\mathbf{U}}) = 0 \quad , \quad (3)$$

其中

$$\begin{aligned}\hat{A} &= \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \hat{\mathbf{U}}} = \xi_x \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}} + \xi_y \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{U}} = \xi_x A + \xi_y B \\ \hat{B} &= \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \hat{\mathbf{U}}} = \eta_x \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}} + \eta_y \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{U}} = \eta_x A + \eta_y B\end{aligned} \quad (4)$$

令 $\varsigma = \xi$ 或 η ，则 \hat{A}, \hat{B} 可以写为统一形式：

$$\hat{C} = \begin{bmatrix} 0 & \varsigma_x & \varsigma_y & 0 \\ \varsigma_x \phi - u\theta & \varsigma_x(2-\gamma)u + \theta & \varsigma_y u - \varsigma_x(\gamma-1)v & \varsigma_x(\gamma-1) \\ \varsigma_y \phi - u\theta & \varsigma_x v - \varsigma_y(\gamma-1)u & \varsigma_y(2-\gamma)v + \theta & \varsigma_y(\gamma-1) \\ (2\phi - \gamma E)\theta & \varsigma_x(\gamma E - \phi) - (\gamma-1)u\theta & \varsigma_y(\gamma E - \phi) - (\gamma-1)v\theta & \gamma\theta \end{bmatrix} \quad (5)$$

其中， γ 为绝热指数，对于完全气体， $\gamma = 1.4$ ， ϕ 和 θ 的定义为：

$$\phi = \frac{\gamma-1}{2}(u^2 + v^2), \quad \theta = \varsigma_x u + \varsigma_y v。$$

显然 $\varsigma = \xi$ 时， $\hat{C} = \hat{A}$ ， $\varsigma = \eta$ 时， $\hat{C} = \hat{B}$ 。另外当 $\xi = x, \eta = y$ 且 $\varsigma = \xi$ 时， $\hat{C} = A$ ；

当 $\xi = x, \eta = y$ 且 $\varsigma = \eta$ 时， $\hat{C} = B$ 。

二、问题描述

假定理想完全气体从左向右运动绕过一个静止的二维翼型。在无穷远处流动是均匀的，速度为 $\mathbf{V}_\infty = u_\infty \mathbf{i} + v_\infty \mathbf{j}$ ，压力 p_∞ 和密度 ρ_∞ 已知。我们取物理平面的求解域如图 1 所示：

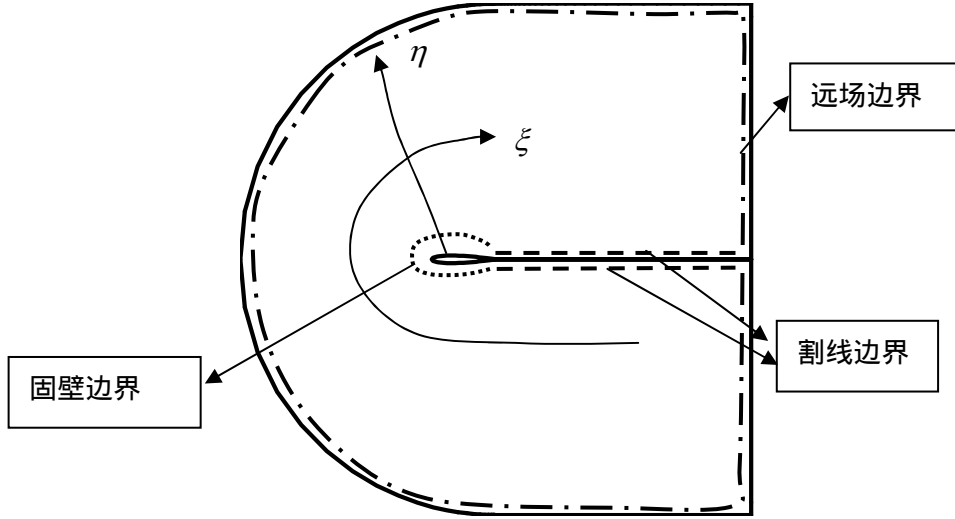


图 1 求解域

在翼型的尾缘画一条割线，把求解域变为单连通域。 ξ 和 η 坐标线的走向如图 1 所示，它们规定了计算平面和物理平面的对应关系。在如图 1 所示的求解域中生成 C 型贴体网格，见图 2。在这个问题中，涉及到三种类型的边界条件，即图 1 所示的固壁边界、远场边界和割线边界。注意，在实际计算中，远场边界应该距离翼型足够远（大约 15-20 倍的翼型弦长）。设 ξ, η 方向的网格点数分别为

M_ξ, M_η ，则各个边界网格点指标的范围为：

远场：

$$\begin{aligned} (\xi_i, \eta_{\max}) &\Leftrightarrow (x_{i, M_\eta}, y_{i, M_\eta}) \quad (i = 0, 1, \dots, M_\xi) \\ (\xi_{\min}, \eta_j) &\Leftrightarrow (x_{0, j}, y_{0, j}) \quad (j = 0, 1, \dots, M_\eta) \quad ; \\ (\xi_{\max}, \eta_j) &\Leftrightarrow (x_{M_\xi, j}, y_{M_\xi, j}) \quad (j = 0, 1, \dots, M_\eta) \end{aligned}$$

割线边界：

$$(\xi_i, \eta_{\min}) \Leftrightarrow (x_{i, 0}, y_{i, 0}) \quad (i = 0, 1, \dots, M_c - 1; i = M_\xi - M_c + 1, \dots, M_\xi) \quad ;$$

固壁边界

$$(\xi_i, \eta_{\min}) \Leftrightarrow (x_{i, 0}, y_{i, 0}) \quad (i = M_c, M_c + 1, \dots, M_\xi - M_c)。$$

其中， M_c 是割线边界上的网格点数。

在生成贴体网格并确定 (ξ, η) 和 (x, y) 之间的对应关系后，我们知道：计算平面的 (ξ_i, η_j) 点对应物理平面的 $(x_{i, j}, y_{i, j})$ 点，一般我们也用 (i, j) 来统一标识计算平面和物理平面网格点的位置。在时间方向，记时间步长为 Δt ， $t_n = n\Delta t$ 。在 $(x_{i, j}, y_{i, j}, t_n)$ 处的数值解记为 $\hat{U}_{i, j}^n$ 。

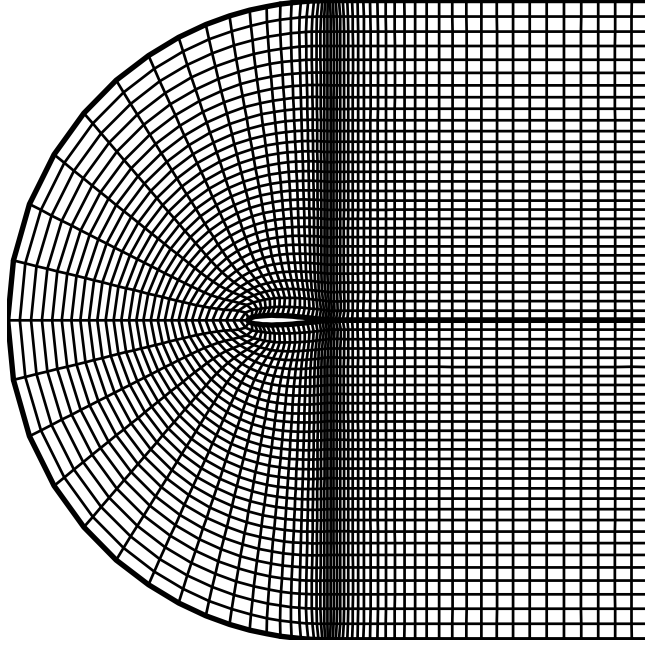


图 2 贴体网格

§2 内点差分格式

本节中，我们讨论求解二维任意曲线坐标下 Euler 方程的 Lax - Wendroff 格式和 MacCormack 格式。

一、Lax - Wendroff 格式

把 $\hat{\mathbf{U}}_{i,j}^{n+1}$ 在 $\hat{\mathbf{U}}_{i,j}^n$ 附近展开，并略去 $O((\Delta t)^2)$ 及更高阶小量，有

$$\hat{\mathbf{U}}_{i,j}^{n+1} = \hat{\mathbf{U}}_{i,j}^n + \left. \frac{\partial \hat{\mathbf{U}}}{\partial t} \right|_{i,j}^n \Delta t + \left. \frac{\partial^2 \hat{\mathbf{U}}}{\partial t^2} \right|_{i,j}^n \frac{(\Delta t)^2}{2}。 \quad (1)$$

由曲线坐标系中的 Euler 方程知

$$\frac{\partial(\hat{\mathbf{U}})}{\partial t} = - \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \eta} \right], \quad (2)$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2(\hat{\mathbf{U}})}{\partial t^2} &= \frac{\partial}{\partial t} \left\{ -\left[\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \eta} \right] \right\} \\
&= -\left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial t} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial t} \right) \right] \\
&= -\left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \hat{\mathbf{U}}} \frac{\partial \hat{\mathbf{U}}}{\partial t} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \hat{\mathbf{U}}} \frac{\partial \hat{\mathbf{U}}}{\partial t} \right) \right] \\
&= \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\hat{A} \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \eta} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\hat{B} \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \eta} \right) \right] \right\}
\end{aligned} \quad (3)$$

把(2),(3)代入(1)式,有

$$\hat{\mathbf{U}}_{i,j}^{n+1} = \hat{\mathbf{U}}_{i,j}^n - \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \eta} \right)_{i,j}^n \Delta t + \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \left[\hat{A} \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \eta} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\hat{B} \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \eta} \right) \right] \right)_{i,j}^n \frac{(\Delta t)^2}{2}. \quad (4)$$

为了达到空间二阶精度,所有空间导数项均采用中心差分离散。具体的说,一阶导数项用两倍步长的中心差分离散

$$\left(\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \eta} \right)_{i,j}^n = \frac{\bar{\delta}_\xi \hat{\mathbf{F}}_{i,j}^n}{2\Delta\xi} + \frac{\bar{\delta}_\eta \hat{\mathbf{G}}_{i,j}^n}{2\Delta\eta} = \frac{\hat{\mathbf{F}}_{i+1,j}^n - \hat{\mathbf{F}}_{i-1,j}^n}{2\Delta\xi} + \frac{\hat{\mathbf{G}}_{i,j+1}^n - \hat{\mathbf{G}}_{i,j-1}^n}{2\Delta\eta}; \quad (5)$$

而二阶导数项的每一重导数均用一倍步长的中心差分离散

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{\partial}{\partial \xi} \left[\hat{A} \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \eta} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\hat{B} \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \eta} \right) \right] \right)_{i,j}^n \\
&= \frac{1}{\Delta\xi} \left[\hat{A}_{i+1/2,j}^n \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \eta} \right)_{i+1/2,j}^n - \hat{A}_{i-1/2,j}^n \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \eta} \right)_{i-1/2,j}^n \right] + \\
&\quad \frac{1}{\Delta\eta} \left[\hat{B}_{i,j+1/2}^n \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \eta} \right)_{i,j+1/2}^n - \hat{B}_{i,j-1/2}^n \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \eta} \right)_{i,j-1/2}^n \right] \\
&= \frac{1}{\Delta\xi} \left[\hat{A}_{i+1/2,j}^n \left(\frac{\hat{\mathbf{F}}_{i+1,j}^n - \hat{\mathbf{F}}_{i,j}^n}{\Delta\xi} + \frac{\hat{\mathbf{G}}_{i+1/2,j+1/2}^n - \hat{\mathbf{G}}_{i+1/2,j-1/2}^n}{\Delta\eta} \right) - \right. \\
&\quad \left. \hat{A}_{i-1/2,j}^n \left(\frac{\hat{\mathbf{F}}_{i,j}^n - \hat{\mathbf{F}}_{i-1,j}^n}{\Delta\xi} + \frac{\hat{\mathbf{G}}_{i-1/2,j+1/2}^n - \hat{\mathbf{G}}_{i-1/2,j-1/2}^n}{\Delta\eta} \right) \right] + \\
&\quad \frac{1}{\Delta\eta} \left[\hat{B}_{i,j+1/2}^n \left(\frac{\hat{\mathbf{F}}_{i+1/2,j+1/2}^n - \hat{\mathbf{F}}_{i-1/2,j+1/2}^n}{\Delta\xi} + \frac{\hat{\mathbf{G}}_{i,j+1}^n - \hat{\mathbf{G}}_{i,j}^n}{\Delta\eta} \right) - \right. \\
&\quad \left. \hat{B}_{i,j-1/2}^n \left(\frac{\hat{\mathbf{F}}_{i+1/2,j-1/2}^n - \hat{\mathbf{F}}_{i-1/2,j-1/2}^n}{\Delta\xi} + \frac{\hat{\mathbf{G}}_{i,j}^n - \hat{\mathbf{G}}_{i,j-1}^n}{\Delta\eta} \right) \right]
\end{aligned} \quad (6)$$

对二阶导数项的每一重导数均用一倍步长的中心差分离散的目的是为了使差分格式的模板点更紧凑。读者可以自己尝试对二阶导数项的每一重导数均用二倍步长的中心差分离散,看最终的差分格式的形式会如何变化。把(5) (6)式代入(4)式,可得 Lax - Wendroff 格式的最终形式为:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{U}}_{i,j}^{n+1} = & \hat{\mathbf{U}}_{i,j}^n - \left(\frac{\hat{\mathbf{F}}_{i+1,j}^n - \hat{\mathbf{F}}_{i-1,j}^n}{2\Delta\xi} + \frac{\hat{\mathbf{G}}_{i,j+1}^n - \hat{\mathbf{G}}_{i,j-1}^n}{2\Delta\eta} \right) \Delta t + \\
& \left\{ \frac{1}{\Delta\xi} \left[\hat{\mathbf{A}}_{i+1/2,j}^n \left(\frac{\hat{\mathbf{F}}_{i+1,j}^n - \hat{\mathbf{F}}_{i,j}^n}{\Delta\xi} + \frac{\hat{\mathbf{G}}_{i+1/2,j+1/2}^n - \hat{\mathbf{G}}_{i+1/2,j-1/2}^n}{\Delta\eta} \right) - \right. \right. \\
& \left. \left. \hat{\mathbf{A}}_{i-1/2,j}^n \left(\frac{\hat{\mathbf{F}}_{i,j}^n - \hat{\mathbf{F}}_{i-1,j}^n}{\Delta\xi} + \frac{\hat{\mathbf{G}}_{i-1/2,j+1/2}^n - \hat{\mathbf{G}}_{i-1/2,j-1/2}^n}{\Delta\eta} \right) \right] + \right. \\
& \left. \frac{1}{\Delta\eta} \left[\hat{\mathbf{B}}_{i,j+1/2}^n \left(\frac{\hat{\mathbf{F}}_{i+1/2,j+1/2}^n - \hat{\mathbf{F}}_{i-1/2,j+1/2}^n}{\Delta\xi} + \frac{\hat{\mathbf{G}}_{i,j+1}^n - \hat{\mathbf{G}}_{i,j}^n}{\Delta\eta} \right) - \right. \right. \\
& \left. \left. \hat{\mathbf{B}}_{i,j-1/2}^n \left(\frac{\hat{\mathbf{F}}_{i+1/2,j-1/2}^n - \hat{\mathbf{F}}_{i-1/2,j-1/2}^n}{\Delta\xi} + \frac{\hat{\mathbf{G}}_{i,j}^n - \hat{\mathbf{G}}_{i,j-1}^n}{\Delta\eta} \right) \right] \right\} \frac{(\Delta t)^2}{2}
\end{aligned} \quad (7)$$

注意到 Euler 方程是一个非线性方程,在二维曲线坐标系中的 Lax - Wendroff 格式比一维标量线性方程的同种格式要复杂得多。要实际求解这一方程,我们还要解决下列问题:

(1) 几何参数计算。在守恒变量和通量中都包含几何参数,即度量系数和 Jacobian。这些几何参数的计算方法我们已经在上一章做了介绍,即用中心差分计算

$$\begin{aligned}
x_\xi)_{i,j} &= \frac{x_{i+1,j} - x_{i-1,j}}{2\Delta\xi} \\
x_\eta)_{i,j} &= \frac{x_{i,j+1} - x_{i,j-1}}{2\Delta\eta} \\
y_\xi)_{i,j} &= \frac{y_{i+1,j} - y_{i-1,j}}{2\Delta\xi} \\
y_\eta)_{i,j} &= \frac{y_{i,j+1} - y_{i,j-1}}{2\Delta\eta}
\end{aligned}$$

而正变换度量系数 $\xi_x, \xi_y, \eta_x, \eta_y$ 和 Jacobian 均可表示为上述逆变换的度量系数的函数。对于静止的贴体网格,这些几何参数只需计算一次,作为全局变量存储起来,以后随时使用。

(2) 整节点通量的计算。通量一般写为原始变量 $\mathbf{W} = (\rho, u, v, p)^T$ 的函数。如果已知 $\hat{\mathbf{U}}_{i,j}^n$, 则计算整节点通量函数的过程一般为

$$\left. \begin{array}{c} \hat{\mathbf{U}}_{i,j}^n \\ J_{i,j} \end{array} \right\} \Rightarrow \mathbf{U}_{i,j}^n \Rightarrow \mathbf{W}_{i,j}^n \Rightarrow \mathbf{F}_{i,j}^n, \mathbf{G}_{i,j}^n \left\{ \begin{array}{c} \Rightarrow \hat{\mathbf{F}}_{i,j}^n, \hat{\mathbf{G}}_{i,j}^n \\ (\xi_x, \xi_y, \eta_x, \eta_y, J)_{i,j} \end{array} \right.$$

这个过程不是一成不变的,读者可以自己研究更方便和高效的计算方法。

(3) 角点通量的计算。在 Lax - Wendroff 格式中,涉及到角点 $(i \pm 1/2, j \pm 1/2)$ 处

的通量函数。在网格充分光滑时，它们可以通过周围整节点通量函数的算术平均得到，例如：

$$\hat{\mathbf{F}}_{i+1/2,j+1/2}^n = \frac{1}{4}(\hat{\mathbf{F}}_{i,j}^n + \hat{\mathbf{F}}_{i+1,j}^n + \hat{\mathbf{F}}_{i,j+1}^n + \hat{\mathbf{F}}_{i+1,j+1}^n)。$$

(4) 半节点的 Jacobi 矩阵的计算。所谓半节点，指 $(i \pm 1/2, j), (i, j \pm 1/2)$ 这些点。

这些点的 Jacobi 矩阵的计算一般有两种方案：

$$\hat{A}_{i+1/2,j}^n = \frac{1}{2}(\hat{A}_{i,j}^n + \hat{A}_{i+1,j}^n)，$$

和

$$\hat{A}_{i+1/2,j}^n = \hat{A}(\hat{\mathbf{U}}_{i+1/2,j}^n, \mathbf{g}_{i+1/2,j})，$$

其中

$$\hat{\mathbf{U}}_{i+1/2,j}^n = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{U}}_{i,j}^n + \hat{\mathbf{U}}_{i+1,j}^n)$$

$$\mathbf{g}_{i+1/2,j} = \frac{1}{2}(\mathbf{g}_{i,j} + \mathbf{g}_{i+1,j})。$$

$$\mathbf{g} = (\xi_x, \xi_y, \eta_x, \eta_y, J)^T$$

在解决了上述问题后，内点就可以根据 Lax - Wendroff 格式推进求解。

二、MacCormack 格式

前面介绍过，对于线性方程，MacCormack 格式和 Lax - Wendroff 格式是等价的。但是，我们即将看到，对于非线性的 Euler 方程，二者不再等价。下面介绍 MacCormack 格式的推导过程。

与 Lax - Wendroff 格式的推导类似，有

$$\hat{\mathbf{U}}_{i,j}^{n+1} = \hat{\mathbf{U}}_{i,j}^n - \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \eta} \right)_{i,j}^n \Delta t - \left(\left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial t} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial t} \right) \right] \right)_{i,j}^n \frac{(\Delta t)^2}{2}。(8)$$

把

$$\left(\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \eta} \right)_{i,j}^n$$

分为两项

$$\left(\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \eta} \right)_{i,j}^n = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \eta} \right)_{i,j}^n + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \eta} \right)_{i,j}^n，(9)$$

代入 (8) 式，有

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{U}}_{i,j}^{n+1} = & \hat{\mathbf{U}}_{i,j}^n - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \eta} \right)_{i,j}^n \Delta t \\ & - \frac{1}{2} \left(\left[\frac{\partial}{\partial \xi} (\hat{\mathbf{F}} + \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial t} \Delta t) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\hat{\mathbf{G}} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial t} \Delta t) \right] \right)_{i,j}^n \Delta t\end{aligned}\quad (10)$$

记

$$\hat{\mathbf{F}}_{i,j}^{\overline{n+1}} = \left(\hat{\mathbf{F}} + \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial t} \Delta t \right)_{i,j}^n, \quad \hat{\mathbf{G}}_{i,j}^{\overline{n+1}} = \left(\hat{\mathbf{G}} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial t} \Delta t \right)_{i,j}^n, \quad (11)$$

则 (10) 式可以写为

$$\hat{\mathbf{U}}_{i,j}^{n+1} = \hat{\mathbf{U}}_{i,j}^n - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \eta} \right)_{i,j}^n \Delta t - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \eta} \right)_{i,j}^{\overline{n+1}} \Delta t. \quad (12)$$

注意到：

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{F}}_{i,j}^{\overline{n+1}} &= \left(\hat{\mathbf{F}} + \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial t} \Delta t \right)_{i,j}^n \approx \hat{\mathbf{F}} \left(\hat{\mathbf{U}} + \frac{\partial \hat{\mathbf{U}}}{\partial t} \Delta t \right)_{i,j}^n \\ \hat{\mathbf{G}}_{i,j}^{\overline{n+1}} &= \left(\hat{\mathbf{G}} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial t} \Delta t \right)_{i,j}^n \approx \hat{\mathbf{G}} \left(\hat{\mathbf{U}} + \frac{\partial \hat{\mathbf{U}}}{\partial t} \Delta t \right)_{i,j}^n\end{aligned}\quad (13)$$

则 (12) 及 (13) 式相当于下面的两步格式：

预测步：

$$\hat{\mathbf{U}}_{i,j}^{\overline{n+1}} = \hat{\mathbf{U}}_{i,j}^n + \frac{\partial \hat{\mathbf{U}}}{\partial t} \Delta t = \hat{\mathbf{U}}_{i,j}^n - \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \eta} \right)_{i,j}^n \Delta t, \quad (14a)$$

校正步：

$$\hat{\mathbf{U}}_{i,j}^{n+1} = \frac{1}{2} [\hat{\mathbf{U}}_{i,j}^n + \hat{\mathbf{U}}_{i,j}^{\overline{n+1}} - \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \eta} \right)_{i,j}^{\overline{n+1}} \Delta t]. \quad (14b)$$

在 (14b) 中，

$$\hat{\mathbf{F}}_{i,j}^{\overline{n+1}} = \hat{\mathbf{F}}(\hat{\mathbf{U}}_{i,j}^{\overline{n+1}}), \quad \hat{\mathbf{G}}_{i,j}^{\overline{n+1}} = \hat{\mathbf{G}}(\hat{\mathbf{U}}_{i,j}^{\overline{n+1}}). \quad (15)$$

下面，讨论 (14) 式具体的离散方法。注意到在连续意义下，(9) 式是精确成立的。从有限差分角度，则有：

$$\begin{aligned}
& \frac{\bar{\delta}_\xi \hat{\mathbf{F}}_{i,j}^n}{2\Delta\xi} + \frac{\bar{\delta}_\eta \hat{\mathbf{G}}_{i,j}^n}{2\Delta\eta} \\
&= \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta_\xi \hat{\mathbf{F}}_{i,j}^n}{\Delta\xi} + \frac{\Delta_\eta \hat{\mathbf{G}}_{i,j}^n}{\Delta\eta} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\nabla_\xi \hat{\mathbf{F}}_{i,j}^n}{\Delta\xi} + \frac{\nabla_\eta \hat{\mathbf{G}}_{i,j}^n}{\Delta\eta} \right) \\
&= \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta_\xi \hat{\mathbf{F}}_{i,j}^n}{\Delta\xi} + \frac{\nabla_\eta \hat{\mathbf{G}}_{i,j}^n}{\Delta\eta} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\nabla_\xi \hat{\mathbf{F}}_{i,j}^n}{\Delta\xi} + \frac{\Delta_\eta \hat{\mathbf{G}}_{i,j}^n}{\Delta\eta} \right), \\
&= \frac{1}{2} \left(\frac{\nabla_\xi \hat{\mathbf{F}}_{i,j}^n}{\Delta\xi} + \frac{\Delta_\eta \hat{\mathbf{G}}_{i,j}^n}{\Delta\eta} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta_\xi \hat{\mathbf{F}}_{i,j}^n}{\Delta\xi} + \frac{\nabla_\eta \hat{\mathbf{G}}_{i,j}^n}{\Delta\eta} \right) \\
&= \frac{1}{2} \left(\frac{\nabla_\xi \hat{\mathbf{F}}_{i,j}^n}{\Delta\xi} + \frac{\nabla_\eta \hat{\mathbf{G}}_{i,j}^n}{\Delta\eta} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta_\xi \hat{\mathbf{F}}_{i,j}^n}{\Delta\xi} + \frac{\Delta_\eta \hat{\mathbf{G}}_{i,j}^n}{\Delta\eta} \right)
\end{aligned}$$

所以,对于二维问题,(9)式对应的分解中至少有四种方案可以保证格式具有空间二阶精度。即 $\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \xi}$ 如果在预测步用前差离散,则校正步用后差离散,反之亦然。

$\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \eta}$ 的离散也是如此。如果预测步 $\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \xi}$, $\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \eta}$ 均用前差离散,则有:

预测步:

$$\hat{\mathbf{U}}_{i,j}^{\bar{n+1}} = \hat{\mathbf{U}}_{i,j}^n - \left(\frac{\Delta_\xi \hat{\mathbf{F}}_{i,j}^n}{\Delta\xi} + \frac{\Delta_\eta \hat{\mathbf{G}}_{i,j}^n}{\Delta\eta} \right) \Delta t, \quad (16a)$$

校正步:

$$\hat{\mathbf{U}}_{i,j}^{n+1} = \frac{1}{2} [\hat{\mathbf{U}}_{i,j}^n + \hat{\mathbf{U}}_{i,j}^{\bar{n+1}} - \left(\frac{\nabla_\xi \hat{\mathbf{F}}_{i,j}^{\bar{n+1}}}{\Delta\xi} + \frac{\nabla_\eta \hat{\mathbf{G}}_{i,j}^{\bar{n+1}}}{\Delta\eta} \right) \Delta t]. \quad (16b)$$

(16) 式为 MacCormack 格式的四种可能形式之一。

容易验证,对于非线性的 Euler 方程,MacCormack 格式和 Lax - Wendroff 格式不是等价的。实际上,从应用角度,MacCormack 格式比 Lax - Wendroff 格式要简单得多。MacCormack 格式无需计算 Jacobi 矩阵和角点的通量,Lax - Wendroff 格式中涉及的插值或平均过程可以完全避免。MacCormack 格式是 20 实际 60 年代末到 70 年代广泛应用的差分格式之一,但目前已经逐渐被一些更先进的数值格式所取代。

三、时间步长的计算

下面我们讨论一下,数值计算中时间步长的确定。对于直角坐标系中的二维 Euler 方程,线性稳定性分析表明,Lax - Wendroff 格式和 MacCormack 格式的稳定性条件为:

$$\Delta t_{i,j} \leq CFL_{\max} \left(\frac{|\lambda_{i,j}^x|_{\max}}{\Delta x} + \frac{|\lambda_{i,j}^y|_{\max}}{\Delta y} \right)^{-1}, \quad (17)$$

其中

$$|\lambda_{i,j}^x|_{\max} = |u_{i,j}| + a_{i,j}, \quad |\lambda_{i,j}^y|_{\max} = |v_{i,j}| + a_{i,j}。$$

CFL_{\max} 是格式允许的最大 CFL 数，对于 Lax - Wendroff 格式和 MacCormack 格式 $CFL_{\max} = 1$ 。在曲线坐标系中，稳定性条件为

$$\Delta t_{i,j} \leq CFL_{\max} (|\lambda_{i,j}^{\xi}|_{\max} + |\lambda_{i,j}^{\eta}|_{\max})^{-1}, \quad (18)$$

其中

$$|\lambda_{i,j}^{\xi}|_{\max} = |\xi_x u + \xi_y v|_{i,j} + (a |\nabla \xi|)_{i,j}, \quad |\lambda_{i,j}^{\eta}|_{\max} = |\eta_x u + \eta_y v|_{i,j} + (a |\nabla \eta|)_{i,j},$$

且 $CFL_{\max} = 1$ 。

在实际计算中，我们取 $CFL \leq CFL_{\max}$ ，则

$$\Delta t_{i,j} = CFL \left(\frac{|\lambda_{i,j}^x|_{\max}}{\Delta x} + \frac{|\lambda_{i,j}^y|_{\max}}{\Delta y} \right)^{-1} \quad (19)$$

或

$$\Delta t_{i,j} = CFL (|\lambda_{i,j}^{\xi}|_{\max} + |\lambda_{i,j}^{\eta}|_{\max})^{-1}。 \quad (20)$$

可见，每一网格点上所允许的最大时间步长是不同的。对于非定常问题，全场所所有网格点上应取同一个时间步长，称为全局（整体）时间步长，在曲线坐标下，

$$\Delta t = \min_{\forall i,j} [CFL (|\lambda_{i,j}^{\xi}|_{\max} + |\lambda_{i,j}^{\eta}|_{\max})^{-1}]。 \quad (21)$$

对于定常问题，时间步长当然也可以通过（21）式计算。但实用中，因为我们只对最终的定常解感兴趣，所以，不同网格点上推进的时间步长可以不同。此时，可以通过（20）式计算每个网格点上采用的时间步长，称为局部时间步长。采用局部时间步长，可以加快收敛到定常解的速度。

§3 边界条件的数值处理

一、特征分析

Euler 方程是双曲型方程，其边界条件的提法和数值处理与其特征性质密切相关。二维问题的特征分析比较复杂，但是，从边界处理的角度，讨论经过简化

的一维问题就足够了。在 $\eta = \text{const}$ 的边界，我们认为流动参数沿 ξ 方向的变化足够小，可以在 Euler 方程中略去对 η 的偏导数项，从而有：

$$\frac{\partial(\hat{\mathbf{U}})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \eta}(\hat{\mathbf{G}}) = 0。 (1)$$

这个方程形式上是一维的，但是有四个独立方程，我们称之为扩张的一维 Euler 方程。该方程写为拟线性形式，有：

$$\frac{\partial(\hat{\mathbf{U}})}{\partial t} + \hat{\mathbf{B}} \frac{\partial}{\partial \eta}(\hat{\mathbf{U}}) = 0。 (2)$$

(2)式的系数矩阵有四个特征值，分别为

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \eta_x u + \eta_y v - a |\nabla \eta| \\ \lambda_2 &= \lambda_3 = \eta_x u + \eta_y v \\ \lambda_4 &= \eta_x u + \eta_y v + a |\nabla \eta| \end{aligned}。 (3)$$

a 是音速。注意到， $\eta = \text{const}$ 的坐标线，其单位法向量为：

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla \eta}{|\nabla \eta|} = \frac{\eta_x \mathbf{i} + \eta_y \mathbf{j}}{|\nabla \eta|}，$$

\mathbf{n} 的方向指向 η 增大的方向。所以，(3) 式也可以写为

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= (V_n - a) |\nabla \eta| \\ \lambda_2 &= \lambda_3 = V_n |\nabla \eta| \\ \lambda_4 &= (V_n + a) |\nabla \eta| \end{aligned}， (4)$$

其中 $V_n = (\mathbf{u}\mathbf{i} + \mathbf{v}\mathbf{j}) \cdot \mathbf{n}$ 是 $\eta = \text{const}$ 边界的法向速度。我们可以写出各个特征值对应的特征关系，在等熵条件下，特征关系可以积分为代数关系，称为 Riemann 不变量：

$$\text{波特征 } \frac{d\eta}{dt} = \lambda_1 : V_n - \frac{2a}{\gamma - 1} = \text{const}， (5a)$$

$$\text{流特征 } \frac{d\eta}{dt} = \lambda_2 : \frac{p}{\rho^\gamma} = \text{const}， (5b)$$

$$\text{流特征 } \frac{d\eta}{dt} = \lambda_3 : V_t = \text{const}， (5c)$$

$$\text{波特征 } \frac{d\eta}{dt} = \lambda_4 : V_n + \frac{2a}{\gamma - 1} = \text{const}。 (5a)$$

其中 $V_t = (\mathbf{u}\mathbf{i} + \mathbf{v}\mathbf{j}) \cdot (\eta_y \mathbf{i} - \eta_x \mathbf{j})$ 为切向速度， $(\eta_y \mathbf{i} - \eta_x \mathbf{j})$ 为切向量。

Euler 方程物理边界条件的个数等于指向求解域内的特征线的条数。

二、固壁边界

在本章的例子中，固壁边界位于：

$$(\xi_i, \eta_{\min}) \Leftrightarrow (x_{i,0}, y_{i,0}) \quad (i = M_c, M_c + 1, \dots, M_\xi - M_c)。$$

我们考虑固壁边界上的一点 $(i,0)$ ，则求解域内沿 η 方向的相邻网格点为 $(i,1)$ ，垂

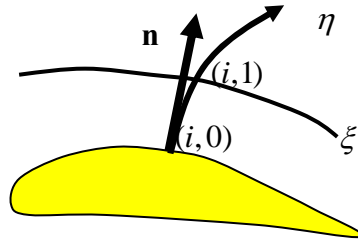


图 1, 固体壁面边界

直壁面的法向量 \mathbf{n} 指向求解域内部（图 1）。由于固壁边界上满足不可穿透条件

$$V_n = \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (6)$$

所以，特征值为

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= (V_n - a)|\nabla \eta| < 0 \\ \lambda_2 &= \lambda_3 = V_n |\nabla \eta| = 0 \\ \lambda_4 &= (V_n + a)|\nabla \eta| > 0 \end{aligned} \quad (7)$$

对于图 1 所示的情形，当特征值大于零时，特征线指向求解域内部。显然，固壁边界只有 λ_4 对应的特征线指向求解域内部，因而只能提一个物理边界条件，即（6）式所示的不可穿透条件。

虽然，从理论流体力学的角度，边界条件（6）式是适定的，因而足以确定 Euler 方程的解，然而，从数值计算的角度，只有（6）式是不够的，因为，在求解 $(i,1)$ 点的差分方程式，需要知道 $(i,0)$ 点所有因变量的值。也就是说，为了使数值计算能够进行下去，我们必须补充三个条件，而这三个条件只能由内点数值解提供。那么，内点数值解应该提供哪些信息呢？这个问题就是所谓边界条件的数值处理问题，是 CFD 中一个相当重要的问题。

一般的说，对于 Euler 方程，特征相容关系恰好可以提供所需的信息。除了指向求解域内的 λ_4 特征线，还有三条特征线不是指向求解域内的，这三条特征线上有三个相容关系：

$$\frac{d\eta}{dt} = \lambda_1 : V_n - \frac{2a}{\gamma-1} = \text{const} ,$$

$$\frac{d\eta}{dt} = \lambda_2 : \frac{p}{\rho^\gamma} = \text{const} , (8)$$

$$\frac{d\eta}{dt} = \lambda_3 : V_t = \text{const}。$$

这三个关系建立了边界点物理量和内点物理量之间的符合物理意义的联系,可以作为补充关系,和边界条件(6)式一起确定边界处所有因变量的值。具体做法是:

由内点数值解外推出边界点的数值解的估计值。为了方便,我们采用原始变量 $\mathbf{W} = (\rho, u, v, p)^T$, 并令边界点的原始变量的估计值为 $\mathbf{W}_{i,0}^{*n}$, 它由内点数值解外推得到。最简单的是零阶外推

$$\mathbf{W}_{i,0}^{*n} = \mathbf{W}_{i,1}^n ,$$

也可以用精度更高的线性外推

$$\mathbf{W}_{i,0}^{*n} = 2\mathbf{W}_{i,1}^n - \mathbf{W}_{i,2}^n。$$

注意, $\mathbf{W}_{i,0}^{*n}$ 一般不满足边界条件。设满足边界条件的边界点数值解为 $\mathbf{W}_{i,0}^n$, 它和 $\mathbf{W}_{i,0}^{*n}$ 之间通过(8)式联系起来:

$$\begin{aligned} V_n)_n)_{i,0} - \frac{2a_{i,0}^n}{\gamma-1} &= V_n^*)_{i,0} - \frac{2a_{i,0}^{*n}}{\gamma-1} \\ \frac{P_{i,0}^n}{(\rho_{i,0}^n)^\gamma} &= \frac{P_{i,0}^{*n}}{(\rho_{i,0}^{*n})^\gamma} \quad 。(9a) \\ V_t)_n)_{i,0} &= V_t^*)_{i,0} \end{aligned}$$

(9)式中上标有*号的量都是已知的。边界条件(6)式可以写为:

$$V_n)_n)_{i,0}^n = 0。 (9b)$$

由(9)式可以解出满足边界条件的边界点数值解为:

$$\begin{aligned} u_{i,0}^n &= u_{i,0}^{*n} (n_y)^2 - v_{i,0}^{*n} (n_x n_y) \\ v_{i,0}^n &= -u_{i,0}^{*n} (n_x n_y) + v_{i,0}^{*n} (n_x)^2 \end{aligned}$$

$$\rho_{i,0}^n = \left(\frac{(\gamma-1)^2 [V_n^*]_{i,0}^n - \frac{2a_{i,0}^{*n}}{\gamma-1}]^2 (\rho_{i,0}^{*n})^\gamma}{4\gamma p_{i,0}^{*n}} \right)^{\frac{1}{\gamma-1}} \quad (10)$$

$$p_{i,0}^n = \frac{p_{i,0}^{*n} (\rho_{i,0}^n)^\gamma}{(\rho_{i,0}^{*n})^\gamma}$$

这样，就完成了固壁边界的数值处理。

在进行边界条件的数值处理时，我们也可以不用（8）式作为补充关系，而采用其他有物理意义的补充条件。参考书第 393 页介绍了通过 Prandtl - Meyer 关系进行固壁边界处理的方法。

三、远场边界

在本章的例子中，远场边界位于：

$$\begin{aligned} (\xi_i, \eta_{\max}) &\Leftrightarrow (x_{i,M_\eta}, y_{i,M_\eta}) \quad (i = 0, 1, \dots, M_\xi) \\ (\xi_{\min}, \eta_j) &\Leftrightarrow (x_{0,j}, y_{0,j}) \quad (j = 0, 1, \dots, M_\eta) \\ (\xi_{\max}, \eta_j) &\Leftrightarrow (x_{M_\xi,j}, y_{M_\xi,j}) \quad (j = 0, 1, \dots, M_\eta) \end{aligned}$$

我们只讨论 $\eta = \eta_{\max}$ 的远场边界的处理，其他远场边界的处理类似。

考虑远场边界上的一点 (i, M_η) ，则求解域内沿 η 方向的相邻网格点为

$(i, M_\eta - 1)$ ，垂直壁面的法向量 \mathbf{n} 指向求解域外部（图 2）。

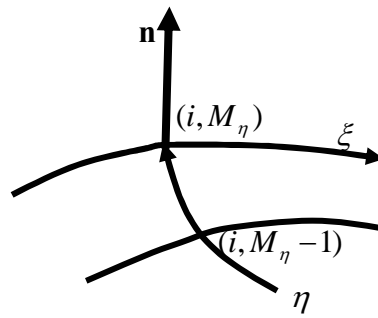


图 2, 远场边界

和固壁边界一样，我们首先用内点数值解外推出边界点数值解 $\mathbf{W}_{i,M_\eta}^{*n}$ 。设满足边界条件的数值解为 \mathbf{W}_{i,M_η}^n ，此外，我们还知道无穷远条件 \mathbf{W}_∞ 。由于远场边界取在距翼型距离为有限远的地方，所以远场边界处的物理量一般不等于 \mathbf{W}_∞ ，

但由于远场边界距翼型足够远，所以 \mathbf{W}_{i,M_η}^n 应相当接近 \mathbf{W}_∞ ，即我们可以用 \mathbf{W}_∞ 作为 \mathbf{W}_{i,M_η}^n 的估计值。下面分四种情况讨论远场边界处理。

1) 超音速进口： $V_{n\infty} < 0, |V_{n\infty}| \geq a_\infty$ 。由于用 \mathbf{W}_∞ 作为 \mathbf{W}_{i,M_η}^n 的估计值，可见此时边界处

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= (V_n - a)|\nabla \eta| < 0 \\ \lambda_2 &= \lambda_3 = V_n|\nabla \eta| < 0 \\ \lambda_4 &= (V_n + a)|\nabla \eta| \leq 0\end{aligned}$$

即所有特征值均小于等于零。根据图 2, 我们知道，此时流体流入远场边界，且每一条特征线均指向求解域内部。所以，我们可以提四个物理边界条件，而无需由内点信息补充任何条件。很自然，无穷远条件可以作为物理边界条件，因此

$$\mathbf{W}_{i,M_\eta}^n = \mathbf{W}_\infty。$$

2) 亚音速进口： $V_{n\infty} < 0, |V_{n\infty}| < a_\infty$ 。此时边界处

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= (V_n - a)|\nabla \eta| < 0 \\ \lambda_2 &= \lambda_3 = V_n|\nabla \eta| < 0 \\ \lambda_4 &= (V_n + a)|\nabla \eta| > 0\end{aligned}$$

所以，只有 λ_4 特征线指向求解域外部，即应提三个物理边界条件，而一个关系要由内点补充。CFD 中常用的方法是：远场条件 \mathbf{W}_∞ 和 \mathbf{W}_{i,M_η}^n 通过 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ 特征线对应的相容关系相联系，构成物理边界条件；而由内点外推得到的数值解 $\mathbf{W}_{i,M_\eta}^{*n}$ 和 \mathbf{W}_{i,M_η}^n 通过 λ_4 特征线对应的相容关系相联系，构成补充条件，即

$$\begin{aligned}V_n^n)_{i,M_\eta} - \frac{2a_{i,M_\eta}^n}{\gamma - 1} &= V_{n\infty} - \frac{2a_\infty}{\gamma - 1} \\ \frac{p_{i,M_\eta}^n}{(\rho_{i,M_\eta}^n)^\gamma} &= \frac{p_\infty}{(\rho_\infty)^\gamma} \\ V_t^n)_{i,M_\eta} &= V_{t\infty} \\ V_n^n)_{i,M_\eta} + \frac{2a_{i,M_\eta}^n}{\gamma - 1} &= V_n^{*n})_{i,M_\eta} + \frac{2a_{i,M_\eta}^{*n}}{\gamma - 1}\end{aligned}$$

由此式可解出 \mathbf{W}_{i,M_η}^n 。

3) 超音速出口： $V_{n\infty} \geq 0, |V_{n\infty}| > a_\infty$ 。此时边界处

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= (V_n - a)|\nabla \eta| > 0 \\ \lambda_2 &= \lambda_3 = V_n |\nabla \eta| > 0 \text{。} \\ \lambda_4 &= (V_n + a)|\nabla \eta| > 0\end{aligned}$$

所以，所有特征线均指向求解域外部，即不应提物理边界条件，所有关系要由内点补充。显然，此时有

$$\mathbf{W}_{i,M_\eta}^n = \mathbf{W}_{i,M_\eta}^{*n} \text{。}$$

4)亚音速出口： $V_{n\infty} \geq 0, |V_{n\infty}| \leq a_\infty$ 。此时边界处

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= (V_n - a)|\nabla \eta| \leq 0 \\ \lambda_2 &= \lambda_3 = V_n |\nabla \eta| \geq 0 \text{。} \\ \lambda_4 &= (V_n + a)|\nabla \eta| > 0\end{aligned}$$

所以，只有 λ_1 特征线指向求解域内部，即应提一个物理边界条件，而三个关系要由内点补充。具体方案是：

$$\begin{aligned}V_n^n)_{i,M_\eta} - \frac{2a_{i,M_\eta}^n}{\gamma - 1} &= V_{n\infty} - \frac{2a_\infty}{\gamma - 1} \\ \frac{P_{i,M_\eta}^n}{(\rho_{i,M_\eta}^n)^\gamma} &= \frac{P_{i,M_\eta}^{*n}}{(\rho_{i,M_\eta}^{*n})^\gamma} \text{。} \\ V_t^n)_{i,M_\eta} &= V_t^{*n})_{i,M_\eta} \\ V_n^n)_{i,M_\eta} + \frac{2a_{i,M_\eta}^n}{\gamma - 1} &= V_n^{*n})_{i,M_\eta} + \frac{2a_{i,M_\eta}^{*n}}{\gamma - 1}\end{aligned}$$

基于特征关系的远场边界条件，有时称无反射条件，因为此时信息的传播方式是：物理边界条件通过相应的特征关系传播到流场内部；而流场内的特定信息通过相应的特征关系传播到边界，这部分信息不会反射回流场内部，对流场的数值解造成不良影响。

四、割线边界

割线边界位于：

$$(\xi_i, \eta_{\min}) \Leftrightarrow (x_{i,0}, y_{i,0}) \quad (i = 0, 1, \dots, M_c - 1; i = M_\xi - M_c + 1, \dots, M_\xi) \text{。}$$

参考§1 中的图 2,显然割线边界并不是真正的边界，而是为了方便网格生成而产生的人工边界。在割线边界不能提任何物理边界条件，处理方法为：引入虚拟网格点，

$$(x_{i,-1}, y_{i,-1}) = (x_{M_\xi-i,1}, y_{M_\xi-i,1}) \quad (i = 0, 1, \dots, M_c - 1; i = M_\xi - M_c + 1, \dots, M_\xi) \text{，}$$

因此，

$$\mathbf{U}_{i,-1}^n = \mathbf{U}_{M_\xi-i,1}^n \quad (i = 0, 1, \dots, M_c - 1; i = M_\xi - M_c + 1, \dots, M_\xi)。(11)$$

根据 (11) 式，割线边界上的数值解可以用内点差分格式直接计算。

§4 求解步骤

根据前面的讨论，我们可以总结二维翼型绕流数值模拟的计算步骤如下：

1) 初始化。确定求解域及贴体网格，计算度量系数和 Jacobian，赋 $n = 0$ 时流场内点的初始值。对于非定常问题，初始值是定解条件的一部分，应该是已知的。当用时间相关方法求解定常问题时，解与初始值无关，此时初始值一般是未知的。在这种情况下，初始值可以根据测量结果或经验给定。一种简单的办法是令内点的初始值均等于无穷远条件；或密度和压力为无穷远处的值，而速度为零。当我们确信，某些非定常问题在时间足够长后，数值解与初始值无关，则也可以用上述方法给定初始条件。

2) 流场数值计算。已知 n 时刻的内点数值解，则流场数值计算的步骤一般为：

A) 时间步长的计算

B) 边界处理。根据 §3 确定 n 时刻边界处数值解。

C) 内点计算。根据 §2 的差分格式确定 $n+1$ 时刻内点数值解。

D) 令 $n \rightarrow n+1$ ，返回 A) 计算下一个时间步的数值解，直至到达规定的时间或得到定常收敛解。

3) 数值解的输出，可视化和分析。