计算流体力学第二次作业

朱林-2200011028

2025 年 3 月 26 日

1 数理算法原理

1.1 对于一阶导数 $\frac{\partial u}{\partial x}$ 的差分格式

1.1.1 采用两个网格点的一阶格式

利用泰勒展开式，对于 u_{i+1}，我们有：

$$u_{i+1} = u_i + \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + O(\Delta x^2) \tag{1}$$

在等式两侧同时除以 Δx，我们可以得到：

$$\frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} = \frac{\partial u}{\partial x} + O(\Delta x) \tag{2}$$

由此可知，差分格式为：

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} \tag{3}$$

将右侧展开后观察阶数：

$$\begin{aligned} \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} &= \frac{u_i + \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + O(\Delta x^3) - u_i}{\Delta x} \\ &= \frac{\Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + O(\Delta x^3)}{\Delta x} \\ &= \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + O(\Delta x^2) \end{aligned} \tag{4}$$

由于截断误差为一阶，所以，该格式为一阶格式。

1.1.2 采用四个网格点的三阶格式

采用待定系数法，我们采用四个网格点来构造差分格式，设这一格式为：

$$\frac{\partial u}{\partial x} = a_1 u_{i-1} + a_2 u_i + a_3 u_{i+1} + a_4 u_{i+2} \tag{5}$$

将 u_{i-1}、、u_{i+1}、u_{i+2} 分别用泰勒展开式展开，得到：

$$\begin{aligned} u_{i-1} &= u_i - \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{(\Delta x)^3}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + O(\Delta x^4) \\ u_{i+1} &= u_i + \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{(\Delta x)^3}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + O(\Delta x^4) \\ u_{i+2} &= u_i + 2\Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + 2(\Delta x)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{4(\Delta x)^3}{3} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + O(\Delta x^4) \end{aligned} \tag{6}$$

带入 (4) 式中，得到：

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial u}{\partial x} &= a_1\left(u_i - \Delta x\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{(\Delta x)^3}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + O(\Delta x^4)\right) + a_2 u_i \\
&+ a_3\left(u_i + \Delta x\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{(\Delta x)^3}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + O(\Delta x^4)\right) \\
&+ a_4\left(u_i + 2\Delta x\frac{\partial u}{\partial x} + 2(\Delta x)^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{4(\Delta x)^3}{3}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + O(\Delta x^4)\right) \\
&= (a_1 + a_2 + a_3 + a_4)u_i + (-a_1 + a_3 + 2a_4)\,\Delta x\frac{\partial u}{\partial x} + \left(\frac{a_1}{2} + \frac{a_2}{2} + a_3 + 2a_4\right)(\Delta x)^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\
&+ \left(-\frac{a_1}{6} + \frac{a_2}{6} + \frac{a_3}{6} + \frac{4a_4}{3}\right)(\Delta x)^3\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + O(\Delta x^3)
\end{aligned} \tag{7}
$$

比较两侧系数得到一下方程组：

$$
\begin{cases}
a_1 + a_2 + a_3 + a_4 & = 0 \\
\Delta x(-a_1 + a_3 + 2a_4) & = 1 \\
\frac{a_1}{2} + \frac{a_3}{2} + 2a_4 & = 0 \\
-\frac{a_1}{6} + \frac{a_3}{6} + \frac{4a_4}{3} & = 0
\end{cases} \tag{8}
$$

解得：

$$
\begin{cases}
a_1 & = -\frac{1}{3\Delta x} \\
a_2 & = -\frac{1}{2\Delta x} \\
a_3 & = \frac{1}{\Delta x} \\
a_4 & = -\frac{1}{6\Delta x}
\end{cases} \tag{9}
$$

因此，最终的四网格点差分格式为：

$$
\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{-2u_{i-1} - 3u_i + 6u_{i+1} - u_{i+2}}{6\Delta x} \tag{10}
$$

为了分析差分格式 $\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{-2u_{i-1}-3u_i+6u_{i+1}-u_{i+2}}{6\Delta x}$ 的截断误差阶数，我们使用泰勒展开法，将各节点值在 u_i 处展开：

$$
\begin{aligned}
u_{i-1} &= u_i - \Delta x\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_i + \frac{\Delta x^2}{2}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_i - \frac{\Delta x^3}{6}\left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_i + \frac{\Delta x^4}{24}\left.\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right|_i + O(\Delta x^5), \\
u_{i+1} &= u_i + \Delta x\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_i + \frac{\Delta x^2}{2}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_i + \frac{\Delta x^3}{6}\left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_i + \frac{\Delta x^4}{24}\left.\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right|_i + O(\Delta x^5), \\
u_{i+2} &= u_i + 2\Delta x\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_i + 2\Delta x^2\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_i + \frac{4\Delta x^3}{3}\left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_i + \frac{2\Delta x^4}{3}\left.\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right|_i + O(\Delta x^5).
\end{aligned}
$$

代入分子表达式并合并同类项：

$$
\begin{aligned}
-2u_{i-1} &= -2u_i + 2\Delta x\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_i - \Delta x^2\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_i + \frac{\Delta x^3}{3}\left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_i - \frac{\Delta x^4}{12}\left.\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right|_i + \cdots, \\
6u_{i+1} &= 6u_i + 6\Delta x\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_i + 3\Delta x^2\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_i + \Delta x^3\left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_i + \frac{\Delta x^4}{4}\left.\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right|_i + \cdots, \\
-u_{i+2} &= -u_i - 2\Delta x\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_i - 2\Delta x^2\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_i - \frac{4\Delta x^3}{3}\left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_i - \frac{2\Delta x^4}{3}\left.\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right|_i + \cdots.
\end{aligned}
$$

合并后：

$$
\text{分子} = \left(6\Delta x\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_i\right) + \left(-\frac{1}{2}\Delta x^4\left.\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right|_i\right) + O(\Delta x^5)
$$

除以 $6\Delta x$ 后得到：

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_i - \frac{1}{12}\Delta x^3 \left.\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right|_i + O(\Delta x^4)$$

截断误差的主项为 $-\frac{1}{12}\Delta x^3 \left.\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right|_i$，故截断误差是三阶的。

1.2 对于二阶导数 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 的差分格式

1.2.1 采用三个网格点的一阶格式

利用泰勒展开式，对于 u_{i+1}，我们有：

$$u_{i+1} = u_i + \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + O(\Delta x^3) \tag{11}$$

对于 u_{i+2}，我们有：

$$u_{i+2} = u_i + 2\Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + 2(\Delta x)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + O(\Delta x^3) \tag{12}$$

利用 (10) 式和 (11) 式，消去 $\frac{\partial u}{\partial x}$，我们可以得到该差分公式：

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u_{i+2} - 2u_{i+1} + u_i}{(\Delta x)^2} \tag{13}$$

将右侧展开后观察阶数：

$$\begin{aligned}\frac{u_{i+2} - 2u_{i+1} + u_i}{(\Delta x)^2} &= \frac{1}{(\Delta x)^2}\cdot [(u_i + 2\Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + 2(\Delta x)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{4(\Delta x)^3}{3}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + O(\Delta x^4)) \\ &- 2(u_i + \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{(\Delta x)^3}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + O(\Delta x^4)) + u_i] \\ &= \frac{(\Delta x)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + (\Delta x)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + O(\Delta x^4)}{(\Delta x)^2} \\ &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + (\Delta x)\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + O(\Delta x^2)\end{aligned} \tag{14}$$

因此，该格式为一阶格式。

1.2.2 采用三个网格点的二阶格式

同理，首先设定差分格式为：

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = b_1 u_{i-1} + b_2 u_i + b_3 u_{i+1} \tag{15}$$

对于 u_{i-1}、u_{i+1}，我们有：

$$\begin{aligned}u_{i-1} &= u_i - \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{(\Delta x)^3}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + O(\Delta x^4) \\ u_{i+1} &= u_i + \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{(\Delta x)^3}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + O(\Delta x^4)\end{aligned} \tag{16}$$

带入得到：

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &= b_1\left(u_i - \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{(\Delta x)^3}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + O(\Delta x^4)\right) \\ &+ b_2 u_i + b_3\left(u_i + \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{(\Delta x)^3}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + O(\Delta x^4)\right) \\ &= (b_1 + b_2 + b_3)u_i + (-b_1 + b_3)\Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + (\frac{b_1}{2} + \frac{b_3}{2})(\Delta x)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ &+ (-\frac{b_1}{6} + \frac{b_3}{6})(\Delta x)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + O(\Delta x^2)\end{aligned} \tag{17}$$

比较两侧系数得到以下方程组：

$$\begin{cases} b_1 + b_2 + b_3 & = 0 \\ -b_1 + b_3 & = 0 \\ (\Delta x)^2(\frac{b_1}{2} + \frac{b_3}{2}) & = 1 \\ -\frac{b_1}{6} + \frac{b_3}{6} & = 0 \end{cases} \tag{18}$$

解得：

$$\begin{cases} b_1 & = \frac{1}{\Delta x^2} \\ b_2 & = -2\frac{1}{\Delta x^2} \\ b_3 & = \frac{1}{\Delta x^2} \end{cases} \tag{19}$$

因此，最终的三网格点差分格式为：

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{\Delta x^2} \tag{20}$$

同理，将右侧展开后观察阶数可以得知该格式为二阶格式。

2 代码生成与调试

计算误差 $error$ 的思路为：

- 定义一个已知解析解的函数，程序中采用的是三次函数 $f_3(x) = x^3 - 2x^2 + 3x + 1$ 和三角函数 $g(x) = \sin(kx)$
- 通过数值方法计算出该函数的一阶导数和二阶导数
- 通过解析解计算出该函数的一阶导数和二阶导数
- 计算数值解与解析解的误差

验证精度的思路为：

- 通过不同的网格步长，计算出数值解
- 计算出不同网格下的误差
- 根据步长与误差的关系，

$$error = C \cdot \Delta x^p + O(\Delta x^{p+1}) + e \tag{21}$$

  其中，C 为常数，p 为阶数,e 为舍入误差将步长与误差同时取对数，如果舍入误差可以忽略，则可以

$$\log(error) = \log(C) + p \cdot \log(\Delta x) \tag{22}$$

  通过线性拟合函数 $y = kx + b$，可以得到拟合函数的斜率 k，与理论阶数 p 相比较，可以通过斜率来验证精度

与此同时，还修改了数据的存储精度，比较了单精度和双精度的计算结果。具体的生成与调试参见 github 仓库：

`https://github.com/ZeroLevelKing/CFD_hw2.git`

git 的 commit 记录如下：

3 结果讨论和物理解释

对于三次函数 $f_3(x) = x^3 - 2x^2 + 3x + 1$ 和三角函数 $g(x) = \sin(kx)$（$k = 0.1$），对于 $x = 1$ 处的导数和二阶导数，按照上述方法得到的数值解与解析解的误差以及拟合结果如下：

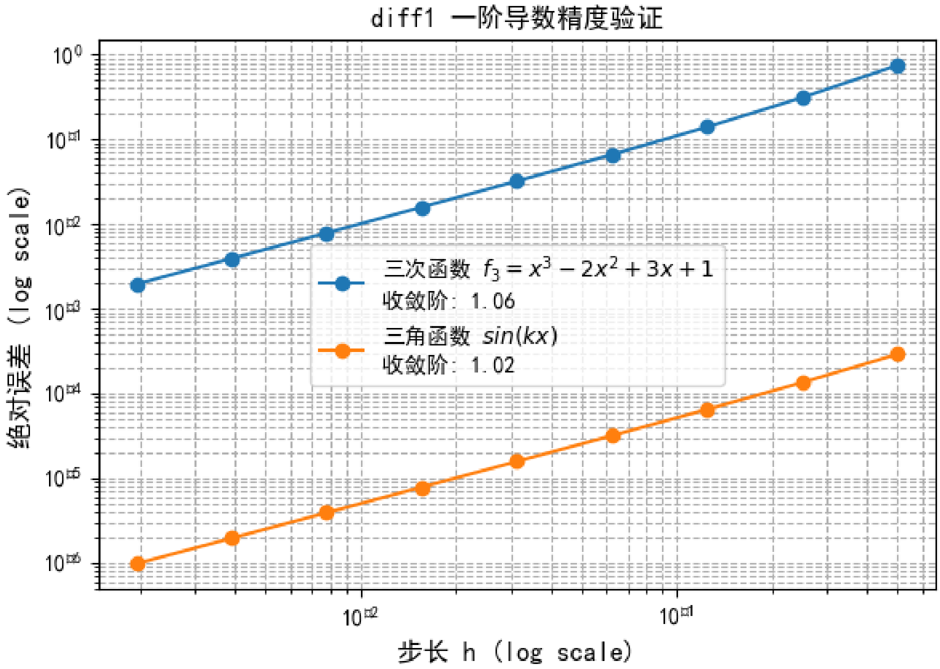

图 1: 差分格式 $\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$ 的误差与拟合结果

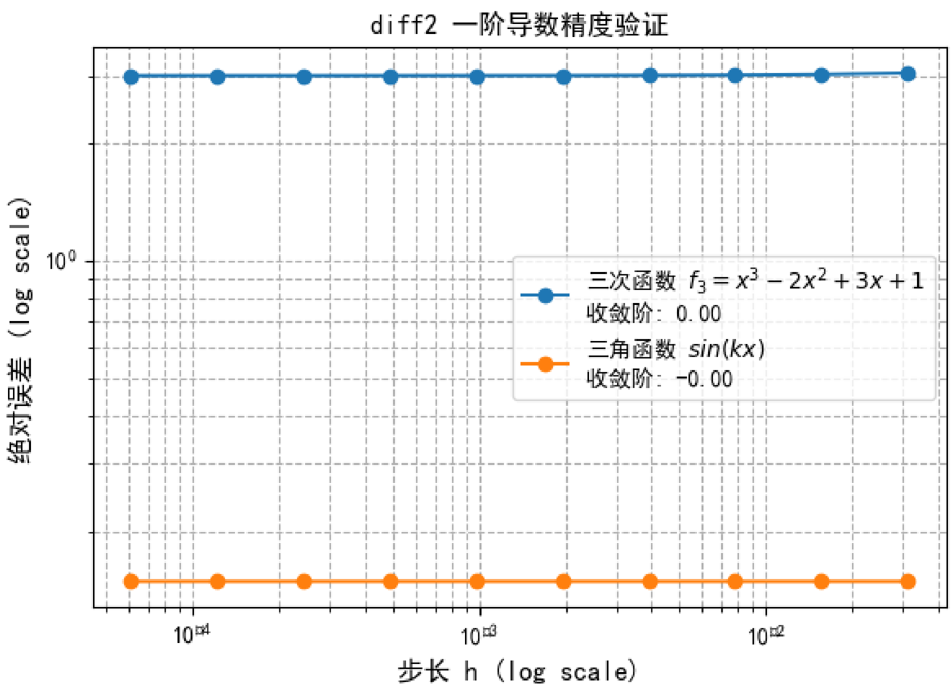

图 2: 差分格式 $\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{-2u_{i-1} - 3u_i + 6u_{i+1} - u_{i+2}}{6\Delta x}$ 的误差与拟合结果

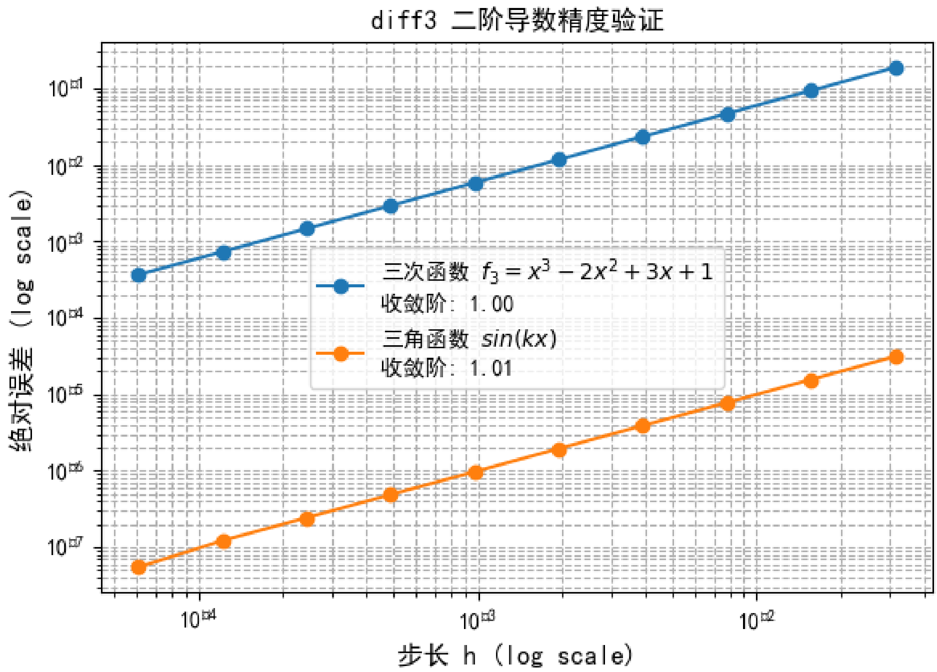

图 3: 差分格式 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u_{i+2}-2u_{i+1}+u_i}{(\Delta x)^2}$ 的误差与拟合结果

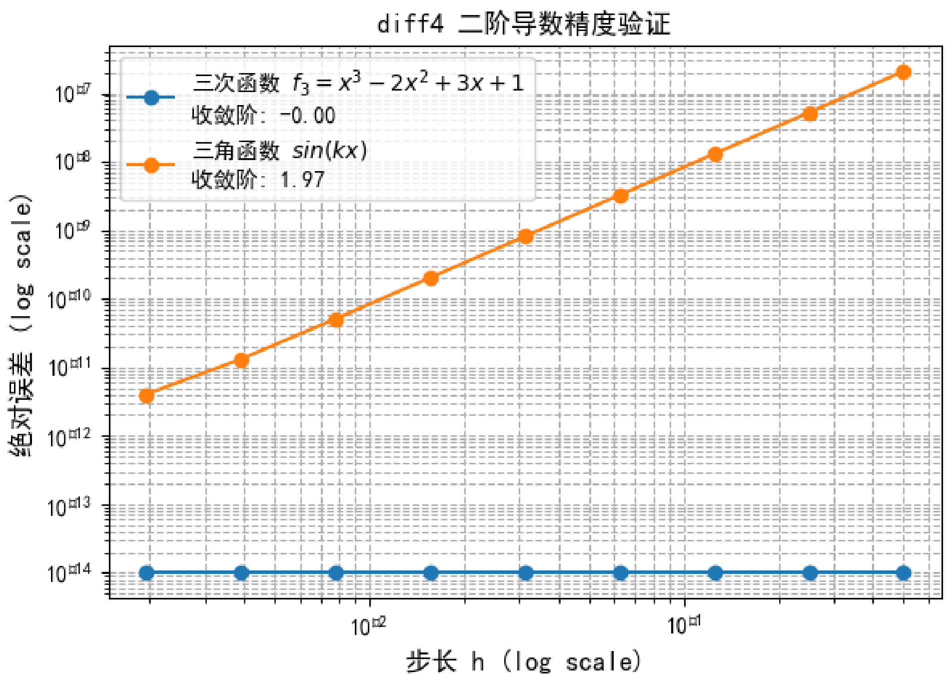

图 4: 差分格式 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u_{i-1}-2u_i+u_{i+1}}{\Delta x^2}$ 的误差与拟合结果

- 通过上述结果可以发现，对于第一种差分格式，可以很明显地观察到其误差与步长的一阶关系，
- 而对于第二种差分格式，理论上应该是三阶关系：对于三次函数，其没有截断误差，只有舍入误差，所以误差不随步长变化；对于三角函数，由于机器精度的限制，舍入误差占据主要因素，

在步长较短时，几乎不随步长变化，导致斜率接近于 0。

- 由图可知，第三种差分格式的收敛阶是 1，与理论吻合很好
- 第四种差分格下：三次函数无截断误差，舍入误差占据主要因素，导致斜率接近于 0；三角函数的收敛阶是 2，与理论吻合很好

对于单精度和双精度对于结果的影响探究如下：

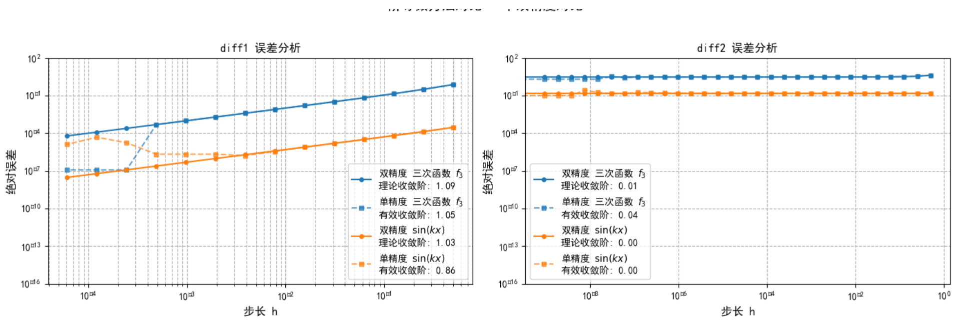

图 5: 单精度和双精度对于一阶导数差分格式的影响

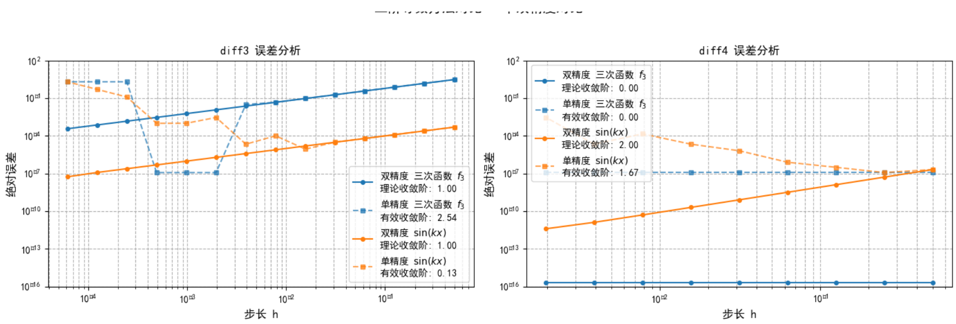

图 6: 单精度和双精度对于二阶导数差分格式的影响

- 可以看出，单精度和双精度的区别主要在步长较小时，舍入误差占据主要因素，单精度由于舍入误差更大，会导致结果偏离理论值。
- 而在步长较大时，单精度和双精度的结果几乎没有区别，说明此时的误差主要影响因素是截断误差。

A AI 工具使用声明表

工具名称	使用目的	使用内容
ChatGPT	代码生成与调试	代码生成、调试、注释
ChatGPT	结果讨论与物理解释	结果讨论、物理解释

表 1: AI 工具使用声明表