

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：

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

在等式两侧同时除以 Δx ，我们可以得到：

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

由此可知，差分格式为：

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

将右侧展开后观察阶数：

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

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：

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

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

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

带入 (4) 式中, 得到:

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

比较两侧系数得到一下方程组:

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

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:

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

代入分子表达式并合并同类项:

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

合并后:

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

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:

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

对于 u_{i+2} , 我们有:

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

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:

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

将右侧展开后观察阶数:

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

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:

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

对于 u_{i-1} 、 u_{i+1} , 我们有:

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

带入得到:

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

比较两侧系数得到以下方程组：

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

解得：

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

因此，最终的三网格点差分格式为：

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

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，

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

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

$$\log(error) = \log(C) + p \cdot \log(\Delta x) \quad (22)$$

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:

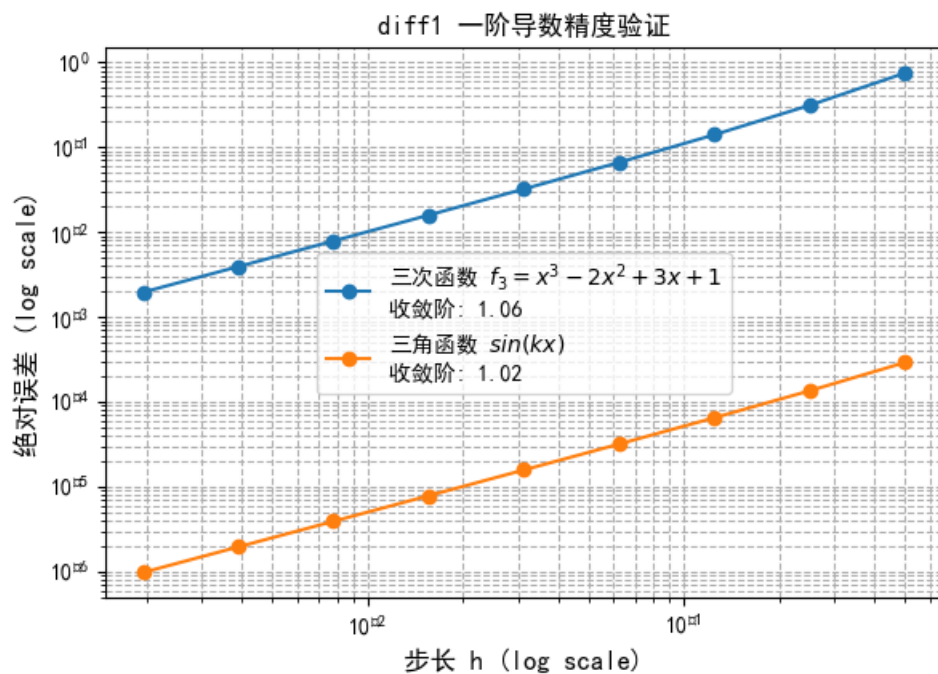


图 1: 差分格式 $\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$ 的误差与拟合结果

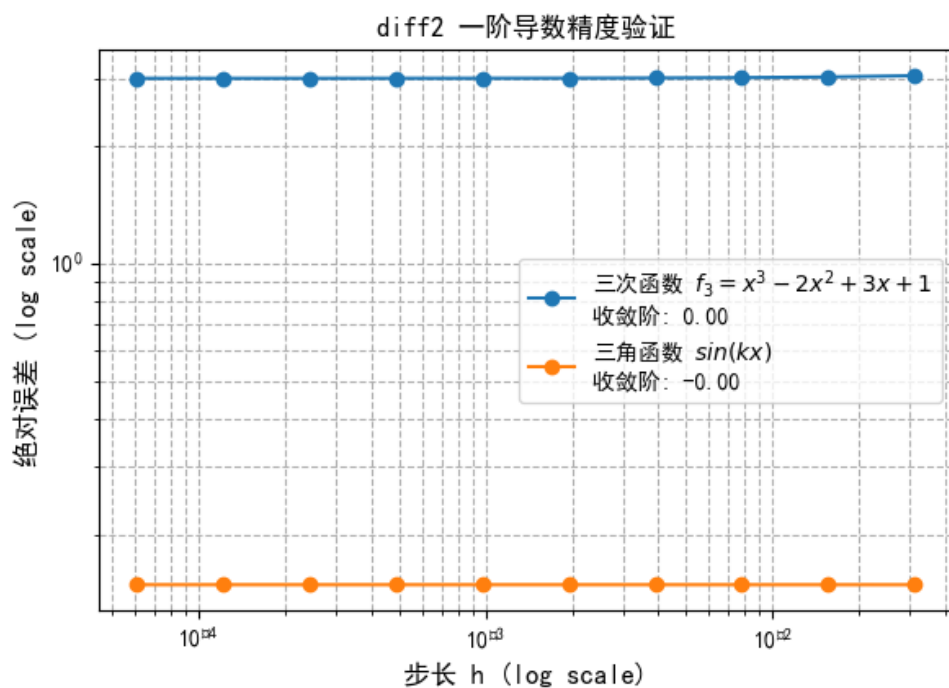


图 2: 差分格式 $\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{-2u_{i-1} - 3u_i + 6u_{i+1} - u_{i+2}}{6\Delta x}$ 的误差与拟合结果

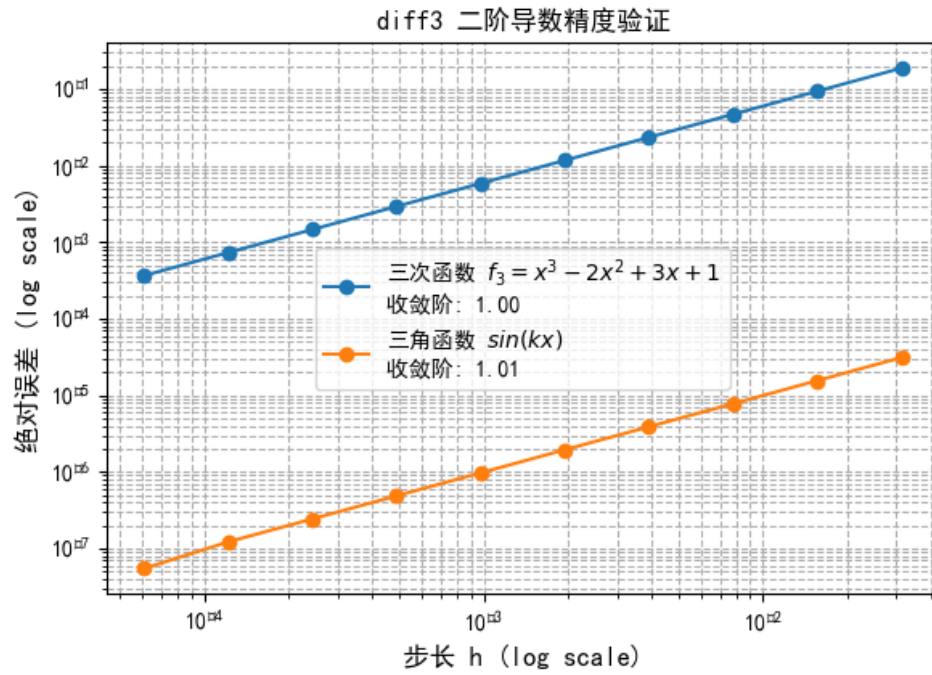


图 3: 差分格式 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u_{i+2} - 2u_{i+1} + u_i}{(\Delta x)^2}$ 的误差与拟合结果

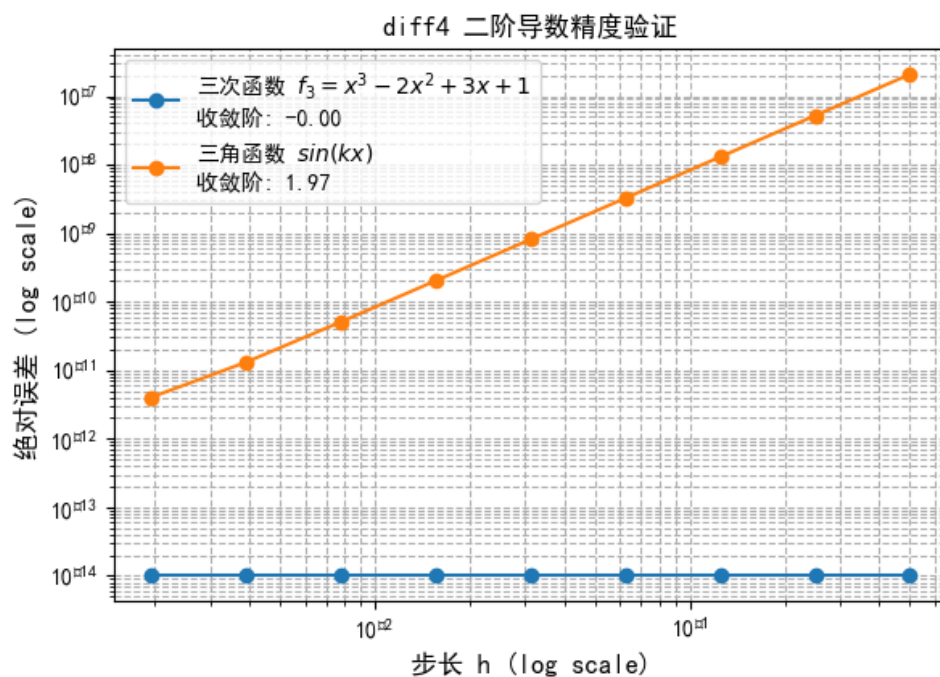


图 4: 差分格式 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{\Delta x^2}$ 的误差与拟合结果

- 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：

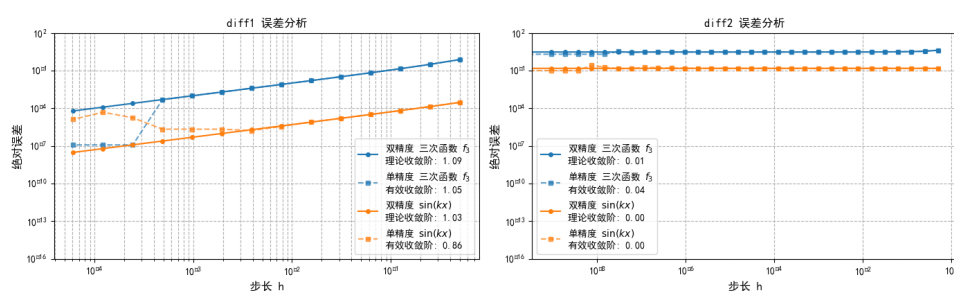


图 5: 单精度和双精度对于一阶导数差分格式的影响

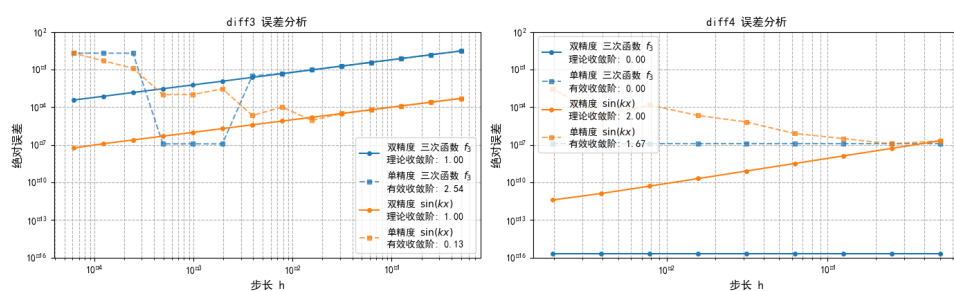


图 6: 单精度和双精度对于二阶导数差分格式的影响

- 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

使用内容	工具名称	使用目的
hw2.tex 1-9 行、图片插入	Github Copilot	调整 pdf 格式，调用宏包，省略插入图片的重复性工作
main.py 6-15 行	DeepSeek	修正 matplotlib 中文显示问题
ReadMe.md 框架	DeepSeek	在 DeepSeek 的帮助下生成一个框架，在此基础上增加而来
.gitignore	Github Copilot	针对于 python 和 latex 的.gitignore 文件，完全由 Copilot 生成