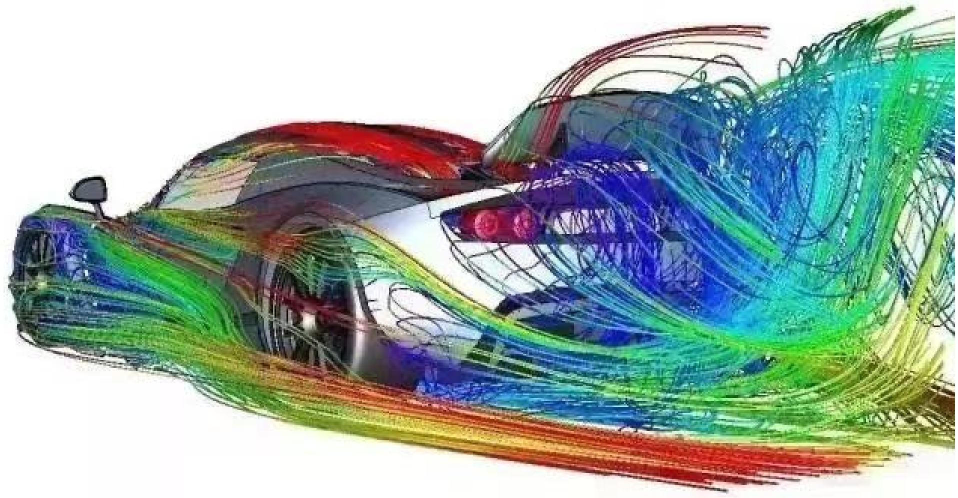


计算流体力学：有限差分法(FDM)数学推导

Pathria
计算物理 分子模拟 上海交通大学博士

在流体动力学应用中，根据流动的特定物理性质选择适当类型的差分格式和适合的求解方法，这些流动可能包括无粘性、粘性、不可压缩、可压缩、无旋转、旋转、层流、湍流、亚音速、跨音速、超音速或高超声速流动。为了适应流体动力学中遇到的这些不同的物理现象，写了不同形式的有限差分方程。给出各种方法来推导低阶和高阶的有限差分方程。基本有限差分方法很简单:**微分方程的导数以因变量和自变量的离散量表示，从而得到在整个域的离散网格点上指定所有未知量的联立代数方程。**

一般方法

考虑函数 $u(x)$ 及其在点 x 处的导数:

$$\frac{\partial u(x)}{\partial x}=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{u(x+\Delta x)-u(x)}{\Delta x}$$

将 $u(x+\Delta x)$ 展开成关于 $u(x)$ 的泰勒级数，得到:

$$u(x+\Delta x)=u(x)+\Delta x\frac{\partial u(x)}{\partial x}+\frac{(\Delta x)^2}{2}\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2}+\frac{(\Delta x)^3}{3!}\frac{\partial^3 u(x)}{\partial x^3}+\cdots$$

代入

$$\frac{\partial u(x)}{\partial x}=\lim_{\Delta x\to 0}\left(\frac{\partial u(x)}{\partial x}+\frac{\Delta x}{2}\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2}+\cdots\right)$$

可知

$$\frac{u(x+\Delta x)-u(x)}{\Delta x}=\frac{\partial u(x)}{\partial x}+\frac{\Delta x}{2}\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2}+\cdots=\frac{\partial u(x)}{\partial x}+\mathrm{O}(\Delta x)$$

在上式中，导数 $\frac{\partial u(x)}{\partial x}$ 在 Δx 中是一阶的，这表明截断误差 $\mathrm{O}(\Delta x)$ 像 Δx 的一次幂一样趋近于零。因此所给出的有限差分形式为一阶精度。

我们可以把 u 写成 $i+1$ 和 $i-1$ 的泰勒级数:

$$u_{i+1}=u_i+\Delta x\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i+\frac{\Delta x^2}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i+\frac{\Delta x^3}{3!}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_i+\frac{\Delta x^4}{4!}\left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right)_i+\cdots$$

$$u_{i-1}=u_i-\Delta x\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i+\frac{\Delta x^2}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i-\frac{\Delta x^3}{3!}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_i+\frac{\Delta x^4}{4!}\left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right)_i+\cdots$$

前向差分:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i=\frac{u_{i+1}-u_i}{\Delta x}+\mathrm{O}(\Delta x)$$

后向差分:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i=\frac{u_i-u_{i-1}}{\Delta x}+\mathrm{O}(\Delta x)$$

中心差分:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i=\frac{u_{i+1}-u_{i-1}}{2\Delta x}+\mathrm{O}\left(\Delta x^2\right)$$

可以看出，前向差分和后向差分的截断误差是一阶的，而中心差分的截断误差是二阶的。最后:

$$\frac{u_{i+1}-2u_i+u_{i-1}}{\Delta x^2}=\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i+\frac{(\Delta x)^2}{12}\left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right)_i+\cdots$$

具有二阶精度的二阶导数有限差分公式:

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i=\frac{u_{i+1}-2u_i+u_{i-1}}{\Delta x^2}+\mathrm{O}\left(\Delta x^2\right)$$

这些结果通过近似曲线斜率可以直观地得到。

常规方法

一般来说，对于任何阶导数，涉及的点数目(任何阶精度)都可以生成有限差分方程。例如，考虑三个点的一阶导数:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i=\frac{au_i+bu_{i-1}+cu_{i-2}}{\Delta x}$$

系数a, b, c可以由上游结点 u_{i-1} 和 u_{i-2} 关于 u_i 的泰勒级数展开来确定（后向差分）。

$$u_{i-1}=u_i+(-\Delta x)\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i+\frac{(-\Delta x)^2}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i+\frac{(-\Delta x)^3}{3!}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_i+\cdots$$

$$u_{i-2}=u_i+(-2\Delta x)\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i+\frac{(-2\Delta x)^2}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i+\frac{(-2\Delta x)^3}{3!}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_i+\cdots$$

从中获得:

$$\begin{aligned}au_i+bu_{i-1}+cu_{i-2}=&(a+b+c)u_i-\Delta x(b+2c)\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i\\&+\frac{\Delta x^2}{2}(b+4c)\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i+\mathrm{O}\left(\Delta x^3\right)\end{aligned}$$

必须满足以下三个条件:

$$a+b+c=0\,b+2c=-1\,b+4c=0$$

得到 $a=3/2, b=-2, c=1/2$,得到:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i=\frac{3u_i-4u_{i-1}+u_{i-2}}{2\Delta x}+\mathrm{O}\left(\Delta x^2\right)$$

如果使用下游节点 u_{i+1} 和 u_{i+2} （正向差分），则有:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i=\frac{-3u_i+4u_{i+1}-u_{i+2}}{2\Delta x}+\mathrm{O}\left(\Delta x^2\right)$$

类似的方法可用于确定二阶导数的有限差分公式:

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i=\frac{u_i-2u_{i-1}+u_{i-2}}{\Delta x^2}+\Delta x\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}+\cdots$$

上述过程可以转化为位移和差分算子的系统形式，从而可以以预先选定的精度阶数得到差分公式。

前向差分公式

泰勒级数展开式

$$u(x+\Delta x)=u(x)+\Delta x\frac{\partial u(x)}{\partial x}+\frac{(\Delta x)^2}{2!}\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2}+\frac{(\Delta x)^3}{3!}\frac{\partial^3 u(x)}{\partial x^3}+\cdots$$

可以写成位移算子E和导数算子D:

$$Eu(x)=\left[1+\Delta xD+(\Delta xD)^2/2!+(\Delta xD)^3/3!+\cdots\right]u(x)$$

$$Du=\tfrac{\partial u}{\partial x}, E=e^{\Delta xD}\ , D=\tfrac{1}{\Delta x}\ln E$$

这些定义得到 u 在 i 处的一阶导数的形式:

$$\left(\tfrac{\partial u}{\partial x}\right)_i=\tfrac{1}{\Delta x}\ln(1+\delta^+)u_i=\tfrac{1}{\Delta x}\left(\delta^+-\tfrac{\delta^{+2}}{2}+\tfrac{\delta^{+3}}{3}-\tfrac{\delta^{+4}}{4}+\cdots\right)u_i$$

向前差分算子:

$$\delta^+=E-1,\quad \delta^+u_i=u_{i+1}-u_i$$

E被定义为

$$Eu_i=u_{i+1},\quad E^nu_i=u_{i+n}$$

现在可以明显地看出，随着右边所保留的次数的增加，精确度也随之增加:

$$\left(\tfrac{\partial u}{\partial x}\right)_i=\tfrac{1}{\Delta x}\left((E-1)-\tfrac{(E-1)^2}{2}+\tfrac{(E-1)^3}{3}-\tfrac{(E-1)^4}{4}+\cdots\right)u_i$$

一阶精度:

$$\left(\tfrac{\partial u}{\partial x}\right)_i=\tfrac{u_{i+1}-u_i}{\Delta x}-\tfrac{\Delta x}{2}\tfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

二阶精度

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i = \frac{-3u_i+4u_{i+1}-u_{i+2}}{2\Delta x} + \frac{\Delta x^2}{3}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}$$

后向差分形式

后向差分公式也可以类似地导出如下形式

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i &= \frac{-1}{\Delta x}\ln\left(1-\delta^-\right)u_i = \frac{1}{\Delta x}\left(\delta^- + \frac{\delta^{-2}}{2} + \frac{\delta^{-3}}{3} + \frac{\delta^{-4}}{4} + \cdots\right)u_i \\ &= \frac{1}{\Delta x}\left[\left(1-E^{-1}\right) + \frac{\left(1-E^{-1}\right)^2}{2} + \frac{\left(1-E^{-1}\right)^3}{3} + \frac{\left(1-E^{-1}\right)^4}{4} + \cdots\right]u_i\end{aligned}$$

中心差分公式

中心差分公式由以下定义推导:

$$\delta u_i = u_{i+1/2} - u_{i-1/2} = \left(E^{1/2} - E^{-1/2}\right)u_i$$

$$\delta = e^{\Delta x D/2} - e^{-\Delta x D/2} = 2\sinh(\Delta x D/2)$$

这就得到了一阶导数的形式:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i = \frac{1}{\Delta x}\left(2\sinh^{-1}\frac{\delta}{2}\right)u_i = \frac{1}{\Delta x}\left(\delta - \frac{\delta^3}{24} + \frac{3\delta^5}{640} - \frac{5\delta^7}{7168} + \cdots\right)u_i$$

得到:

二阶精度(含第一项):

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i = \frac{u_{i+\frac{1}{2}} - u_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x} - \frac{\Delta x^2}{24}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}$$

四阶精度(包括前两项):

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i = \frac{1}{24\Delta x}\left(-u_{i+\frac{3}{2}} + 27u_{i+\frac{1}{2}} - 27u_{i-\frac{1}{2}} + u_{i-\frac{3}{2}}\right) + \frac{3}{640}\Delta x^4\frac{\partial^5 u}{\partial x^5}$$

高阶导计算方法

高阶导数的有限差分公式可以使用算子技术导出，类似于一阶导数的差分公式。考虑正向差分关系，将其推广到高阶导数为:

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial^n u}{\partial x^n}\right)_i &= \frac{1}{\Delta x^n}\left[\ln\left(1+\delta^+\right)\right]^n u_i \\ &= \frac{1}{\Delta x^n}\left[\delta^{+n} - \frac{n}{2}\delta^{+(n+1)} + \frac{n(3n+5)}{24}\delta^{+(n+2)}\right. \\ &\left.-\frac{n(n+2)(n+3)}{48}\delta^{+(n+3)} + \cdots\right]u_i\end{aligned}$$

后向差分:

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{\partial^n u}{\partial x^n}\right)_i &= \frac{-1}{\Delta x^n}\left[\ln\left(1-\delta^-\right)\right]^n u_i \\
&= \frac{1}{\Delta x^n}\left(\delta^- + \frac{\delta^{-2}}{2} + \frac{\delta^{-3}}{3} + \cdots\right)^n u_i \\
&= \frac{1}{\Delta x^n}\left[\delta^{-n} + \frac{n}{2}\delta^{-(n+1)} + \frac{n(3n+5)}{24}\delta^{-(n+2)}\right. \\
&\left. + \frac{n(n+2)(n+3)}{48}\delta^{-(n+3)} + \cdots\right] u_i
\end{aligned}
$$

中心差分公式:

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{\partial^n u}{\partial x^n}\right)_i &= \left(\frac{2}{\Delta x}\sinh^{-1}\frac{\delta}{2}\right)^n u_i \\
&= \frac{1}{\Delta x^n}\left[\delta - \frac{\delta^3}{24} + \frac{3\delta^5}{640} - \frac{5\delta^7}{7168} + \cdots\right]^n u_i \\
&= \frac{1}{\Delta x^n}\delta^n\left[1 - \frac{n}{24}\delta^2 + \frac{n}{64}\left(\frac{22+5n}{90}\right)\delta^4\right. \\
&\left. - \frac{n}{4^5}\left(\frac{5}{7} + \frac{n-1}{5} + \frac{(n-1)(n-2)}{3^5}\right)\delta^6 + \cdots\right] u_i
\end{aligned}
$$

当n为偶数时，得到整数网格点上的差分公式。如果n是不均匀的，则差分公式涉及半整数网格点。为了保持整数网格点，我们可以使用:

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{\partial^n u}{\partial x^n}\right)_i &= \frac{\mu}{\left(1+\frac{\delta^2}{4}\right)^{\frac{1}{2}}}\left(\frac{2}{\Delta x}\sinh^{-1}\frac{\delta}{2}\right)^n u_i \\
&= \mu\frac{\delta^n}{\Delta x^n}\left[1 - \frac{n+3}{24}\delta^2 + \frac{5n^2+52n+135}{5760}\delta^4 + \cdots\right] u_i
\end{aligned}
$$

根据这些公式，我们总结了下面的二阶导数项:

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i &= \frac{1}{\Delta x^2}\left(\delta^{+2} - \delta^{+3} + \frac{11}{12}\delta^{+4} - \frac{5}{6}\delta^{+5} + \cdots\right) u_i\ , \\
\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i &= \frac{1}{\Delta x^2}\left(\delta^{-2} + \delta^{-3} + \frac{11}{12}\delta^{-4} + \frac{5}{6}\delta^{-5} + \cdots\right) u_i\ , \\
\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i &= \frac{1}{\Delta x^2}\left(\delta^2 - \frac{\delta^4}{12} + \frac{\delta^6}{90} - \frac{\delta^8}{560} + \cdots\right) u_i\ , \\
\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i &= \frac{\mu}{\Delta x^2}\left(\delta^2 - \frac{5\delta^4}{24} + \frac{259}{5760}\delta^6 + \mathrm{O}\left(\Delta x^8\right)\right) u_i
\end{aligned}
$$

多维有限差分公式

利用一维有限差分公式的结果，可以导出多维有限差分公式。对于二维，我们考虑:

$$x_i = x_0 + i\Delta x\ y_j = y_0 + j\Delta y$$

x和y方向的一阶偏导是:

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{ij} &= \frac{1}{\Delta x}\delta_x^+ u_{ij} + \mathrm{O}(\Delta x) = \frac{u_{i+1,j}-u_{i,j}}{\Delta x} + \mathrm{O}(\Delta x) \\
\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{ij} &= \frac{1}{\Delta y}\delta_y^+ u_{ij} + \mathrm{O}(\Delta x) = \frac{u_{i,j+1}-u_{i,j}}{\Delta y} + \mathrm{O}(\Delta y)
\end{aligned}
$$

类似地，二阶导数的二阶中心差分公式为这种形式:

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{ij} = \frac{u_{i+1,j}-2u_{i,j}+u_{i-1,j}}{\Delta x^2} - \frac{\Delta x^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)_{ij} = \frac{u_{i,j+1}-2u_{i,j}+u_{i,j-1}}{\Delta y^2} - \frac{\Delta y^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$$

现在让我们考虑拉普拉斯方程：

$$\nabla^2 u=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}=0$$

从而得到一个五点格式：

$$\begin{aligned}\Delta u_{ij}=&\left(\frac{\delta_x^2}{\Delta x^2}+\frac{\delta_y^2}{\Delta y^2}\right)u_{ij}=\frac{u_{i-1,j}-2u_{i,j}+u_{i+1,j}}{\Delta x^2}+\frac{u_{i,j-1}-2u_{i,j}+u_{i,j+1}}{\Delta y^2}\\&+\mathrm{O}\left(\Delta x^2,\Delta y^2\right)\end{aligned}$$

$$\Delta^{(1)}u_{ij}=\frac{u_{i+1,j}+u_{i-1,j}+u_{i,j-1}+u_{i,j+1}-4u_{i,j}}{\Delta x^2}-\frac{\Delta x^2}{12}\left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}+\frac{\partial^4 u}{\partial y^4}\right)$$

另一种表示形式为：

$$\begin{aligned}\Delta^{(2)}u_{ij}&=\left[\left(\frac{1}{\Delta x}\mu_y\delta_x\right)^2+\left(\frac{1}{\Delta y}\mu_x\delta_y\right)^2\right]u_{ij}\\&=\left[\frac{1}{4\Delta x^2}\left(E_y+2+E_y^{-1}\right)\left(E_x-2+E_x^{-1}\right)\right.\\&\quad\left.+\frac{1}{4\Delta y^2}\left(E_x+2+E_x^{-1}\right)\left(E_y-2+E_y^{-1}\right)\right]u_{ij}\end{aligned}$$

对于高阶项，我们可以写成：

$$\begin{aligned}\Delta^{(2)}u_{ij}=&\left(1+\frac{\Delta y^2}{4}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\Delta x^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right)\\&+\left(1+\frac{\Delta x^2}{4}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+\frac{\Delta y^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial y^4}\right)_{ij}\\=&\Delta u_{ij}+\frac{1}{12}\Delta x^2\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}+\frac{1}{12}\Delta y^2\frac{\partial^4 u}{\partial y^4}+\left(\frac{\Delta x^2+\Delta y^2}{4}\right)\frac{\partial^4 u}{\partial x^4\partial y^4}+\cdots\end{aligned}$$

可以推导出著名的九点公式：

$$\begin{aligned}\Delta^{(3)}u_{ij}&=\left(a\Delta^{(1)}+b\Delta^{(2)}\right)u_{ij}\\&=\frac{1}{\Delta x^2}\left[\left(\delta x^2+\delta y^2\right)+\frac{b}{2}\delta x^2\delta y^2\right]u_{ij}=\Delta^{(1)}u_{ij}+\frac{b}{2}\delta x^2\delta y^2 u_{ij}\\&=\Delta u_{ij}+\frac{\Delta x^2}{12}\left[\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}+\frac{\partial^4 u}{\partial y^4}+6b\frac{\partial^4 u}{\partial x^4\partial y^4}\right]\end{aligned}$$

已经证明了有限差分方程可以用许多不同的方法来推导。介绍了利用有限差分算子、微分算子、前向差分算子和后向差分算子的简单方法和更严格的一般方法。给出了多维中各种阶导数的应用。还展示了如何获得高阶精度的有限差分方程，对复杂的物理现象如冲击波和湍流很有用。最终目标是微分方程解的准确性,为了达到这种精度，差分方程必须满足三个条件:一致性、稳定性和收敛性。其中，一致性和稳定性的性质属于有限差分方程的发展领域。满足一致性和稳定性的要求，则为收敛性。满足这些标准的结果是CFD精度的保证。

编辑于 2022-05-27 16:26

数学分析 计算流体力学（CFD）

▲ 赞同 29 ▼ 添加评论 分享 喜欢 收藏 申请转载 ···

写下你的评论...

还没有评论，发表第一个评论吧

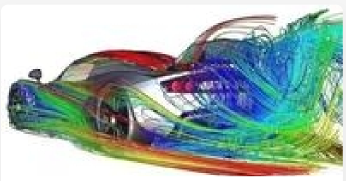
文章被以下专栏收录

计算流体力学理论及算法
网格生成、自适应方法、程序实现、前沿探索及应用

推荐阅读

计算流体力学 | 差分方法

阑珊离索 发表于CFD



计算流体力学：有限差分法(FDM)、有限元法(FEM)和有…

Pathr... 发表于计算流体力...

计算流体力学笔记 有限差分法 3-3

守恒型差分格式如在方程\begin{equation} \frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial f(u)}{\partial x}=0 \end{equation} 中，若差分格式可以表示为差量形式\begin{equation} \frac{…

好逸恶劳

统计力学-1 等几率原理

zhhjc 发表于hjc的物...