大多数数值模拟流体的“乐趣”是从边界条件的正确性来获得的。那么流体在边界发生了什么呢？

现在，让我们把注意力放在两种边界条件上，固体墙(solid walls)和自由表面(free surface)。

固体墙边界是流体与固体接触的地方。这可以用速度来表示：流体是无法进入到固体中，所以速度的法向部分必须为0：



当固体自身运动时，情况会变得稍微复杂点。一般的，我们需要流体速度的法向分量与固体速度的法向分量想匹配，所以相对速度的法向分量为0：



在所方程中，是固体边界上的法向量。这有时被称为不粘(no-stick)条件，因为只限制速度法向分量，我们允许流体沿着切线方向自由滑动。这是一个非常重要的点需要记忆：流体的切线速度可能与固体的切线速度一点关系都没有。

那么固体墙上的压力是什么样的？我们又要回想一下压力的定义“无论如何都要保持流体的不可压缩性。”我们还有再加上一句“并且强制满足固体墙的边界条件。”项在动量方程中甚至作用在边界上，所以压力要在固体墙上控制，显然存在着与有关某个东西，这就是众所周知的压力法向导数：。

这就是固体墙关于无粘性流体的全部内容了。如果我们考虑粘性力，情况会变得稍微复杂。在这种情况下，固体的粘性对流体速度的切向成分的一般影响必须是匹配的。这被称为无滑(no-slip)边界条件，意味着



或者如果固体在运动时，



对于具有非常低但非零粘度的流体，当观察固体附近流体的微观细节时，这实际上比不粘条件更准确，但是粘性的效果和无粘条件只能在固体附近的细微边界层中看到，而流体的其他地方看起来似乎存在无粘条件。边界层是比较难的研究领域，但是相对于流体模拟，这块区域影响较小。

当你思考一滴水从固体上落下时，可能会对边界条件感到困惑：当水滴的速度法向分量在固体表面上为0时，事实上它是如何从固体上分离的。从某个层面上来说分离并不是连续介质模型的属性：这是一个分子尺度过程并不能被分离掉。一般的，我们要么从模拟方法中的数值误差免费得到近似真实的分离，或者随便得到一个不真实的结果。Batty等人[BBB07]介绍了一种更加“宏观”的分离模型，该模型满足一个不等式，允许流体离开墙面但不允许进入，不等式如下：



有时固体墙可能是个通风口或排水沟，流体能从中流过。在这种情况下，我们显然希望与墙面的速度不同。

另一个边界条件是自由表面。例如，我们模拟水溅在四周，水与非固体墙面所接触的自由表面。在这种情况下，空气符合条件，但我们不想模拟空气。因为空气比水轻700倍，无论如何无法达到那样的效果。我们把空气当成压强为常量的区域。实际上，我们一般空气压强设置为0，此时自由表面为1，流体的速度不受任何控制。

自由表面的另一种情况是我们要在一个大的区域中模拟一块体积较小的流体：例如，在空气中模拟烟雾。我们无法模拟地球上整个大气层，所以只能用一个网格覆盖“感兴趣”的区域。之前模拟区域的边界依旧存在，但我们不跟踪它；我们允许流体自由进出区域，所以本质上还要考虑自由表面,,即使没有可见表面。

关于自由表面的最有一个衷告：对于小体量流体，表面张力非常重要。在分子层面上，表面张力存在是因为不同类型的分子之间吸引力的强度不同。例如，水分子受到其它水分子的吸引力比受到空气分子的大得多，所以表面上的水分子会尽可能的将水体包围起来与空气分离。从几何角度来看，物理化学家建立了这样一个模型：一个力尽量最小化（流体的）表面面积，或者试图减小（流体的）表面平均曲率。你可以把第一个想法（最小化表面积）解释为张力

不断试图缩小表面，因此名称表面张力;第二种方法使用平均曲率可能会更方便一些。（稍后，在第8章中，我们将讨论如何实际测量平均曲率，以及它的意义。）总之，该模型是两种流体间的压强跳变，与平均曲率成正比：



表示压强跳变，例如，水面两侧和空气两侧测量的压强差，是表面张力系数，可以通过查表得到（水和空气在室温下大概为），是平均曲率，单位为.自由表面与水的压强跳跃(假设空气压强为0)：

 (1.4)