

计算船舶流体力学

王献孚 周树信
陈泽梁 杨 驰 刘应中 编

上海交通大学出版社

沪新登字 205 号

内 容 简 介

本书以计算流体力学理论为基础，主要介绍应用较广泛的基本计算方法，亦涉及较新的计算方法。全书共分四篇，包括有限差分法、有限元法、边界元法、有限分析法和谱分析法。全书内容按照船舶流体力学的要求进行阐述，并力求反映近年来有关计算流体力学的新发展及其在造船领域中应用的新成果。各篇还介绍了大量参考文献。

本书由浅入深，重视基本概念的阐述及其基本方法的逻辑性，数值算例特别注意结合船舶专业的实际。

本书可用于造船专业、海洋工程专业的研究生教材，也可供有关专业的教师和从事造船和海洋工程研究、设计的工程技术人员参考。

计 算 船 舶 流 体 力 学

出 版：上海交通大学出版社
(淮海中路 1984 弄 19 号)

发 行：新华书店上海发行所

印 刷：上海交通大学印刷厂

开 本：787×1092(毫米) 1/16

印 张：22.25

字 数：540000

版 次：1992 年 10 月 第 1 版

印 次：1992 年 11 月 第 1 次

印 数：1—1480

科 目：273—320

ISBN7—313—01042—7/U·66

定 价：6.05 元

目 录

第 1 篇 有限差分法

第 1 章 有限差分法基础	(3)
§1-1-1 有限差分法	(3)
§1-1-2 差分公式及其基本构造方法	(6)
§1-1-3 差分方程的相容性、收敛性和稳定性	(11)
§1-1-4 差分方程稳定性分析	(13)
§1-1-5 有限体积法	(19)
第 2 章 泊松型方程	(21)
§1-2-1 泊松型方程差分解法概述	(21)
§1-2-2 平面叶栅绕流	(25)
§1-2-3 边界贴体坐标·泊松方程的应用	(31)
§1-2-4 应用贴体坐标求解二维机翼的势流问题	(37)
§1-2-5 船波问题的一种有限差分求解法	(39)
第 3 章 波动型方程	(43)
§1-3-1 典型方程	(43)
§1-3-2 双曲型方程的特征线和适定问题	(44)
§1-3-3 收敛性和稳定性 CFL 条件	(45)
§1-3-4 几种差分格式	(48)
§1-3-5 浅水波的一种有限差分求解法	(54)
第 4 章 扩散方程	(57)
§1-4-1 扩散方程的定解问题	(57)
§1-4-2 显式差分解法	(58)
§1-4-3 隐式差分解法	(60)
§1-4-4 Crank-Nicolson 差分格式	(62)
§1-4-5 ADI 方法	(64)
§1-4-6 AF 算法	(66)
第 5 章 对流-扩散方程	(68)
§1-5-1 对流-扩散方程	(68)
§1-5-2 几种常用的差分格式	(69)
§1-5-3 Keller 盒式 (box) 差分格式	(73)

§1-5-4	边界层方程有限差分解法	(75)
§1-5-5	近似指数型方法	(79)
§1-5-6	流场计算的“SIMPLE”算法	(84)

第6章 水动力学中N-S方程 (90)

§1-6-1	流函数和涡量方法	(90)
§1-6-2	MAC方法	(96)
§1-6-3	分步方法	(101)
§1-6-4	人工可压缩性方法	(103)
§1-6-5	非线性船波的有限差分解法	(104)

第7章 数值精度和误差估计 (109)

§1-7-1	守恒型差分公式	(109)
§1-7-2	误差估计	(110)
§1-7-3	细分网格	(111)
§1-7-4	利用 Richardson 外推法减小离散误差	(112)
§1-7-5	高阶精度的有限差分方法	(114)

第1篇参考文献 (115)

第2篇 有限元法

第1章 关于有限元法一些预备知识 (121)

§2-1-1	关于线性空间的基本概念	(121)
§2-1-2	运算子与泛函数	(127)
§2-1-3	雷利-利兹法	(129)
§2-1-4	加权余量法	(133)

第2章 有限元法的一般介绍 (138)

§2-2-1	有限元法的基本思想	(138)
§2-2-2	单元矩阵的形成	(140)
§2-2-3	系统方程的形成	(144)
§2-2-4	代数方程组的解	(146)
§2-2-5	求解线性代数方程组的误差估计	(150)
§2-2-6	一个完整的例题——无限流体中的圆柱绕流	(151)

第3章 解域的剖分和插值函数 (158)

§2-3-1	对插值函数的一般要求	(158)
§2-3-2	三角形单元的一阶连续性函数	(158)
§2-3-3	矩形单元的一阶连续性函数	(166)

§2-3-4 等参单元	(169)
§2-3-5 二阶连续性插值函数	(175)
第4章 理想流体的有限元计算	(177)
§2-4-1 有升力物体的绕流计算	(177)
§2-4-2 自由表面问题	(178)
§2-4-3 二维附加质量和阻尼的计算	(180)
§2-4-4 渗流问题的有限元解法	(184)
§2-4-5 沿岸海域的调和响应	(186)
第5章 粘性流体的有限元法	(193)
§2-5-1 纳维-斯托克斯方程与虚功原理	(193)
§2-5-2 流函数-旋涡法	(194)
§2-5-3 压力和速度方法	(200)
§2-5-4 迎风有限元方法	(202)
§2-5-5 分步杂交有限元方法	(206)
第2篇参考文献	(210)

第3篇 边界元法

第1章 理论基础	(215)
§3-1-1 概述	(215)
§3-1-2 格林定理	(216)
§3-1-3 基本解	(218)
§3-1-4 不可压缩势流的基本解	(219)
§3-1-5 偶极子与旋涡诱导速度之间的等价原则	(227)
§3-1-6 平面面元奇点分布形态	(228)
§3-1-7 理想不可压缩流体绕流问题的求解	(229)
§3-1-8 定解条件	(232)
第2章 无升力物体的绕流问题	(234)
§3-2-1 概述	(234)
§3-2-2 方程的离散	(234)
§3-2-3 几何处理	(235)
§3-2-4 影响系数 C_i 的计算	(238)
§3-2-5 中场及远场公式	(240)
§3-2-6 控制点位置的选取	(242)
§3-2-7 高次网格法	(243)
§3-2-8 卞保琦偶极子分布法	(244)

§3-2-9 船体表面流线计算	(246)
第3章 涡环栅格法	(249)
§3-3-1 基本方程	(249)
§3-3-2 影响系数的计算	(251)
§3-3-3 物面上压力分布的计算	(251)
§3-3-4 计算升力面的马蹄涡网格法	(253)
§3-3-5 网格法在螺旋桨性能计算上的应用	(259)
第4章 薄物体的绕流计算	(264)
§3-4-1 概述	(264)
§3-4-2 小扰动线化边界条件	(264)
§3-4-3 厚度问题的源汇解	(266)
§3-4-4 厚度问题的数值解法	(266)
§3-4-5 升力问题的旋涡解	(272)
§3-4-6 升力问题的数值解法	(274)
§3-4-7 几何处理	(276)
§3-4-8 讨论	(276)
第5章 边界元法在自由表面问题上的应用	(278)
§3-5-1 线性兴波阻力问题	(278)
§3-5-2 大物体的线性波浪力	(284)
§3-5-3 边界积分方程的时间步进法	(290)
第3篇 参考文献	(297)

第4篇 其他方法

第1章 有限分析解法	(301)
§4-1-1 椭圆型偏微分方程的有限分析解法	(301)
§4-1-2 几点讨论	(303)
§4-1-3 定常不可压 Navier-Stokes 方程的有限分析解	(306)
§4-1-4 不定常的对流扩散方程	(308)
第2章 流体力学中的谱方法	(310)
§4-2-1 Galerkin(谱) 近似	(310)
§4-2-2 Chebyshev多项式的谱展开	(312)
§4-2-3 伪谱近似	(315)
§4-2-4 非线性重力波演化的高阶谱方法	(317)
附录 (A) Chebyshev多项式展开的某些性质	(320)

第3章 随机方法的应用	(323)
§4-3-1 Glimm的随机选取法	(323)
§4-3-2 随机涡团法	(326)
附录(B) 浅水波的 Riemann 问题	(328)
第4章 多重网格法	(334)
§4-4-1 迭代法的收敛率	(334)
§4-4-2 双网格方法	(335)
§4-4-3 多层网格法	(336)
§4-4-4 完整的多重网格法	(338)
§4-4-5 MG 方法各个环节的选取	(339)
第4篇 参考文献	(341)

第1篇 有 限 差 分 法

第1章 有限差分法基础

§1-1-1 有限差分法

有限差分法 (Finite Difference Methods, 缩写 FDM) 是求解流体力学中偏微分方程边值问题和初值问题的一种有效的数值方法。其原理 (或形式) 似乎很简单, 它将研究区域中用有限个离散点上函数值, 近似地代替偏微分方程的连续解式, 用相邻离散点上函数值的差商代替偏微分方程中的微商, 用区域中离散点上近似值所组成的代数方程组 (差分方程组) 来逼近原来的偏微分方程, 然后通过数值求解代数方程组, 得到离散点上函数值, 称为有限差分法。有限差分法适用于求解线性问题和非线性问题。

应用有限差分法求解问题时, 需要将所研究的区域划分网格, 网格一般都是规则的, 如 $x-y$ 平面上矩形网格尺寸取 Δx 和 Δy , 根据需要和计算精度确定网格的疏密程度。网格交点 (结点) 常定义为离散点, 结点 (i, j) 的编号如图 1-1-1 所示。从物理上分析, 所求解的

变量随 x 或 y 缓慢变化的区域内没有必要划分成细网格, 只有在求解变量随 x 或 y 较大的变化区域内, 才需要用精细的网格。从数学上看, 当网格尺寸取得很小而趋近于零时, 离散点数无限增加, 有限差分法的解才可能收敛到接近偏微分方程在该点处的准确解, 故划分网格的粗细直接影响到数值解的精度。

通过网格划分作离散化处理后, 对流动区域中求解函数的偏导数 (如 $\frac{\partial u}{\partial x}$ 、

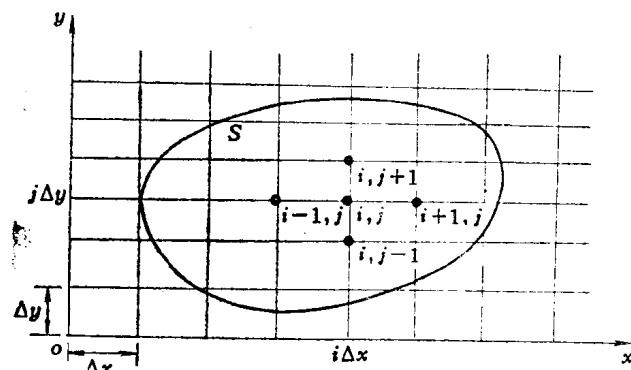


图 1-1-1

$\frac{\partial u}{\partial y}$ 等), 分别用网格结点之间的差商代替, 即 $\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i, j} \simeq \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i, i}$, $\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{i, j} \simeq \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{i, i}$ 等。而构造差商可采用不同格式, 如

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i, j} = \frac{u_{i+1, j} - u_{i, j}}{\Delta x} \quad (1-1-1)$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i, j} = \frac{u_{i, j} - u_{i-1, j}}{\Delta x} \quad (1-1-2)$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i, j} = \frac{u_{i+1, j} - u_{i-1, j}}{2\Delta x} \quad (1-1-3)$$

以上三种差分形式分别称为前差分、后差分和中心差分, 其几何意义如图 1-1-2 所示。假定图中曲线为 y 值一定时函数 $u(x, y)$ 的准确解式, 故前差分表示弦线 PB 的斜率近似地代替 P

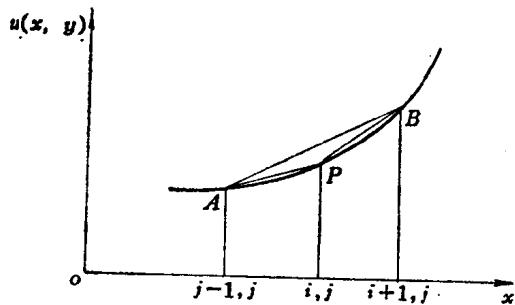


图1-1-2

式构造法。

(2) 差分方程的相容性、收敛性和稳定性。它们表示差分方程的解在所取的差分步长趋于零时，应趋于微分方程定解问题的真解。差分方程的相容性、收敛性和稳定性，不仅要求当所取的差分步长趋于零时，以差商代替微商所导致的截断误差应趋于零，差分方程趋同于微分方程（即相容性），并且在差分方程的计算过程中，任何误差（如舍入误差）的传播愈来愈小或者是有界的，才能获得稳定的收敛解（即收敛性和稳定性）。

当然，差分方程的收敛性和稳定性的先决条件为微分方程问题是适定的(well posed)，即它的解“存在”并在求解区域内是“唯一”的，而且具有“连续性”。所谓“连续性”是指所给微分方程以及边界条件和初始条件中的参数如稍有出入（扰动），其解式仍应“存在”和“唯一”，并且扰动后的唯一解与扰动前的解相差无几，即仍能得到物理问题的正确近似解。然而，微分方程的适定性和差分方程的相容性，还不能保证差分方程的收敛性和稳定性，如何保证有限差分法计算中的收敛性和稳定性是需要讨论的一个基本问题。

(3) 差分方程的解法。偏微分方程的初值和边值问题的求解，应用有限差分法都转化为线性或非线性代数方程组的求解，根据代数方程组的特点采用特殊的解法。

以上这些基本问题，对各类具体问题的要求和侧重各不相同，椭圆型方程主要是差分格式及其解法，对双曲型和抛物型方程首先是收敛性和稳定性问题。因此，从应用的角度，我们应着重掌握和了解各种差分格式的构造法及其稳定性（收敛性）问题，并密切注意计算精度和计算速度。

椭圆型、双曲型和抛物型方程，在流体力学中都会遇到。方程类型的判别，在数学上或物理上常常是明确的，如以二阶线性偏微分方程为例：

$$a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + d \frac{\partial u}{\partial x} + e \frac{\partial u}{\partial y} + f u + g = 0 \quad (1-1-4)$$

式中，系数 a, b, \dots, g 都是 x, y 的函数，其判别式：

$$\left. \begin{array}{l} b^2 - 4ac < 0 \\ b^2 - 4ac = 0 \\ b^2 - 4ac > 0 \end{array} \right\} \begin{array}{l} (\text{椭圆型}) \\ (\text{抛物型}) \\ (\text{双曲型}) \end{array} \quad (1-1-5)$$

典型的椭圆型方程有拉普拉斯方程、泊松方程等，如

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \quad (1-1-6)$$

它相当于取式(1-1-4)中， $a = 1, b = 0, c = 1$ ，因此有 $b^2 - 4ac < 0$ ，故为椭圆型方程。椭圆型方程在物理上的特性，其区域中的解值受整个边界上边界条件的影响，即求解它时必须规

点处曲线斜率，后差分表示弦线 AP 的斜率近似地代替 P 点处曲线斜率，中心差分则表示弦线 AB 的斜率近似代替 P 点处曲线斜率。取不同差分公式，不仅会有不同精度的截断误差，还会影响逼近偏微分方程的差分方程解式的收敛性和稳定性。有限差分法的基本问题有：

(1) 具有各种精度和各种功能的差分格

定整个闭域上的边界条件。椭圆型方程在数学上只有在一定的边界条件下才是适定的，如 Dirichlet 问题（闭域边界上给定函数值），Neumann 问题（边界上给定函数的一次法向导数值），以及一部分边界上给定函数值，另一部分边界上给定函数的一次法向导数值是适定的。作为计算流体力学工作者，只是根据纯数学家们的这些理论去对力学问题作出数学表述和求解，详见本篇第 2 章。

典型的抛物型方程有一维不定常热传导方程

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (1-1-7)$$

式中， T 表示温度， x 和 t 分别为空间坐标和时间， κ 为介质热传导系数。式 (1-1-7) 相当于取式 (1-1-4) 中， $y=t$, $a=\kappa$, $b=0$, $c=0$ ，因此有 $b^2 - 4ac = 0$ ，故为抛物型方程。在不可压缩流体中，无限平板沿自身平面 x 方向突然运动，引起垂直于平板的 y 向边界层流体运动方程为

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad (1-1-8)$$

式中， u 为 x 向流体速度， ν 为流体运动粘性系数。如在边界层内引入涡量 ξ ，则式 (1-1-8) 可写为

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 \xi}{\partial y^2} \quad (1-1-9)$$

这是涡量在一维空间的扩散方程，它们都是抛物型方程。抛物型方程在物理上的特性，就时间变量来说，区域中在某一给定瞬时的解值只能受到该瞬时以前所发生的条件影响，下一时刻尚未发生的状态不会对本时刻发生的状态产生影响。对于不定常热传导方程，实际上只是对时间为抛物型性质，而对空间坐标仍为椭圆型问题，即空间坐标前后和左右条件都会影响其状态变化。通常只要有一个自变量为抛物型的，它们的耦合问题都称为抛物型问题。抛物型方程不限于对时间作单向变化的不定常流动问题，如果在一个坐标方向上有很强的单向流动，那么，在流场中各状态量的影响只能从上游传播到下游，于是其状态主要受上游条件的影响，而受下游条件的影响很小，也可近似地看作是抛物型问题。如沿平板 (x 向) 二维定常边界层方程

$$U \frac{\partial U}{\partial x} + V \frac{\partial U}{\partial y} = \nu \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} \quad (1-1-10)$$

在物理上可理解为它在 x 向坐标方程是抛物型的，在 y 向坐标方程是椭圆型的，合起来通常仍称为抛物型的。

根据抛物型方程的物理特性，求解时只需规定函数的初值条件或函数的初边值条件，即抛物型方程的求解域是开域（对时间或空间某坐标为开域）。从数学上分析，抛物型方程的适定性要求在一条开直线 $(-\infty, +\infty)$ 上给定初值，而不像椭圆型方程那样要求在一封闭边界上给定边值。在实际问题中，由于解域总是有限的，在解域外的初值条件对域内的解有一定影响，这些失去的初值可以用有限解域上边界条件代替，这样，抛物型方程的适定条件又成为初边值问题，详见本篇第 4 章。

典型的双曲型方程有波动方程，如

$$\frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2} = a^2 \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} \quad (1-1-11)$$

为一维浅水波方程。式中 η 为波高, a 为波速, 它相当于取式(1-1-4)中 $y=t$, $a=a^2$, $b=0$, $c=-1$, 因此 $b^2-4ac>0$, 故为双曲线型方程。双曲线型方程在物理上的特性, 其区域中物理量沿着波传播方向(数学上称特征线方向)向下游影响, 从这一意义上相似于抛物型方程特性, 即具有单向影响的特性, 但这种单向特性并不是沿着坐标方向, 而是沿着称为特征线(扰动传播线)方向, 故对双曲线型方程除在特征线上作计算外, 对所取坐标变量来说, 这种单向特性便不再存在, 其状态受影响的特性又完全与椭圆型方程相同。双曲线型方程在数学上的适定条件, 需同时给出初边值, 其求解域对时间也为开域, 详见本篇第3章。

三种类型方程的求解, 它们各有特点, 我们将结合流动问题分别加以讨论。实际流动问题的方程很复杂, 有时方程的类型很标准, 但有时会呈现非标准的混合类型。非定常不可压缩粘性流(N-S方程)是抛物型的; 非定常可压缩无粘流是双曲线型的; 不可压缩位势流则是椭圆型的, 但在具有自由表面的条件下, 在自由表面上又是双曲线型的, 故呈现混合类型特性。有时在流动中对方程类型改变的分界面也常常是未知的, 这会使计算带来新的困难, 这种新困难不会在求解标准形式方程中遇到, 应另外研究解决。在可压缩流动中, 如对超声速流, 远离物体边界处流动方程是双曲线型的, 近物体边壁处由于粘性效应, 当边界层无分离时, 方程是抛物型的, 而当边界层分离时在分离区, 方程又是椭圆型的。对定常跨声速流动, 在超声速区方程为双曲线型, 在亚声速区方程是椭圆型。这种混合类型方程的计算方法, 可借鉴来处理不可压缩流动的问题。

§1-1-2 差分公式及其基本构造方法

前面已指出差分公式的三种基本类型, 即前差分(forward difference), 后差分(backward difference)和中心差分(centered difference)。为了解这三种差分公式的精度, 以及推演出其他形式的差分公式, 可利用泰勒级数展开式得到。图1-1-1所示为 $x-y$ 平面上的矩形网格, 通常以下标 (i, j) 表示网格结点的编号(index), 上标 n 表示时间的计算步级。如 $f_{i,j}^n$ 表示编号为 (i, j) 的坐标点处, 时间步级为 n 步时的 f 值。现考虑 $f_{i,j}^n$ 的一阶偏导数 $\frac{\partial f}{\partial x}$ 的差分公式, 将 $f_{i+1,j}^n$ 的值在 $f_{i,j}^n$ 邻域以泰勒级数形式展开, 为简便起见, 这里暂不标记时间的上指标, 则有

$$f_{i+1,j} = f_{i,j} + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{i,j} \Delta x + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_{i,j} \Delta x^2 + \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right)_{i,j} \Delta x^3 \\ + \frac{1}{24} \left(\frac{\partial^4 f}{\partial x^4}\right)_{i,j} \Delta x^4 + O(\Delta x^5) \quad (1-1-12)$$

如将 Δx 的二阶以上的项统统截断, 解出 $\frac{\partial f}{\partial x}$ 为:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{f_{i+1,j} - f_{i,j}}{\Delta x} + E_{i,j} \quad (1-1-13a)$$

其中

$$E_{i,i} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right)_{i,i} \Delta x + O(\Delta x^2) \quad (1-1-13b)$$

式中, $O(\Delta x^2)$ 是 Δx^2 量级的项, 包含 Δx^3 、 Δx^4 、 \cdots 等高阶项。定义 $\frac{\partial f}{\partial x}$ 的前差分 $\frac{\delta f}{\partial x}$ 为

$$\left(\frac{\delta f}{\partial x} \right)_{i,i} = \frac{f_{i+1,i} - f_{i,i}}{\Delta x} \quad (1-1-14)$$

比较式(1-1-13)和(1-1-14)可见, 前差分的截断误差 (truncation error) $E_{i,i}$ 为包含二阶导数的 Δx 量级的项, 其精度为一阶。

同样, 如将离散点函数 $f_{i-1,i}$ 在 $f_{i,i}$ 处以泰勒级数展开, 则有

$$\begin{aligned} f_{i-1,i} &= f_{i,i} - \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{i,i} \Delta x + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right)_{i,i} \Delta x^2 - \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right)_{i,i} \Delta x^3 \\ &\quad + \frac{1}{24} \left(\frac{\partial^4 f}{\partial x^4} \right)_{i,i} \Delta x^4 + O(\Delta x^5) \end{aligned} \quad (1-1-15)$$

将 Δx 的高阶项统统截断, 解出 $\frac{\partial f}{\partial x}$ 为

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{i,i} = \frac{f_{i,i} - f_{i-1,i}}{\Delta x} + E_{i,i} \quad (1-1-16a)$$

其中

$$E_{i,i} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right)_{i,i} \Delta x + O(\Delta x^2) \quad (1-1-16b)$$

故又有一阶精度的 $\frac{\partial f}{\partial x}$ 的后差分定义式

$$\left(\frac{\delta f}{\partial x} \right)_{i,i} = \frac{f_{i,i} - f_{i-1,i}}{\Delta x}$$

函数 f 对 y 和 t 求偏导数的前差分或后差分一阶精度的定义式, 都可类似地写出, 如一阶精度 $\frac{\partial f}{\partial t}$ 的前差分定义式为

$$\left(\frac{\delta f}{\partial t} \right)^n = \frac{f_{i,i}^{n+1} - f_{i,i}^n}{\Delta t} \quad (1-1-17)$$

和 $\frac{\partial f}{\partial t}$ 一阶精度的后差分定义式为

$$\left(\frac{\delta f}{\partial t} \right)^n = \frac{f_{i,i}^n - f_{i,i}^{n-1}}{\Delta t} \quad (1-1-18)$$

为了确定中心差分的定义式, 利用两个泰勒级数展开式(1-1-12)减去式(1-1-15), 则有

$$f_{i+1,i} - f_{i-1,i} = 2 \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{i,i} \Delta x + \frac{1}{3} \left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right)_{i,i} \Delta x^3 + O(\Delta x^5)$$

解出 $\frac{\partial f}{\partial x}$ 为

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{i,i} = \frac{f_{i+1,i} - f_{i-1,i}}{2 \Delta x} + E_{i,i} \quad (1-1-19a)$$

其中 $E_{ii} = -\frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right)_{ii} \Delta x^2 + O(\Delta x^4)$ (1-1-19b)

定义中心差分为

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{ii} = \frac{f_{i+1, i} - f_{i-1, i}}{2 \Delta x} \quad (1-1-20)$$

由此可见，中心差分的截断误差 E_{ii} 为包含三阶导数的 Δx^2 量级的项，比前差分或后差分有更高一阶的精度。

如将两个泰勒级数展开式(1-1-12)和(1-1-15)相加，还可导出二阶导数的中心差分的定义式，因有

$$f_{i+1, i} + f_{i-1, i} = 2f_{ii} + \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right)_{ii} \Delta x^2 + \frac{1}{12} \left(\frac{\partial^4 f}{\partial x^4} \right)_{ii} \Delta x^4 + O(\Delta x^6) \quad (1-1-21)$$

解出 $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$ 为

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right)_{ii} = \frac{f_{i-1, i} - 2f_{ii} + f_{i+1, i}}{\Delta x^2} + E_{ii} \quad (1-1-22a)$$

其中 $E_{ii} = -\frac{1}{12} \left(\frac{\partial^4 f}{\partial x^4} \right)_{ii} \Delta x^2 + O(\Delta x^4)$ (1-1-22b)

定义二阶导数的中心差分为

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right)_{ii} = \frac{f_{i-1, i} - 2f_{ii} + f_{i+1, i}}{\Delta x^2} \quad (1-1-23)$$

其截断误差 E_{ii} 为包含四阶导数的 Δx^2 量级的项，精度为二阶。

高阶导数的中心差分式可相应地推出，如三阶导数中心差分为

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right)_{ii} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right)_{ii} = \frac{\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right)_{i+1, i} - \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right)_{i-1, i}}{2 \Delta x} \\ &= -\frac{1}{2 \Delta x^3} (f_{i+2, i} - 2f_{i+1, i} + 2f_{i-1, i} - f_{i-2, i}) \end{aligned} \quad (1-1-24)$$

其截断误差亦为 Δx^2 量级。类似地可求得四阶导数中心差分公式为

$$\left(\frac{\partial^4 f}{\partial x^4} \right)_{ii} = \frac{1}{\Delta x^4} (f_{i+2, i} - 4f_{i+1, i} + 6f_{ii} - 4f_{i-1, i} + f_{i-2, i}) \quad (1-1-25)$$

其截断误差亦为 Δx^2 量级。

为了获得更高精度各阶导数的差分公式，可以利用更多个相邻离散点之间泰勒级数展开式，将它们组合求得，如令

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{ii} = af_{ii} + bf_{i+1, i} + cf_{i+2, i} + O(\Delta x^m) \quad (1-1-26)$$

其中， a 、 b 、 c 和 m 是待定系数，将 $f_{i+1, i}$ 和 $f_{i+2, i}$ 的泰勒级数展开式代入式(1-1-26)，整理后得

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{i,i} &= (a+b+c)f_{i,i} + (b\Delta x + 2c\Delta x)\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{i,i} \\ &\quad + (\frac{1}{2}b\Delta x^2 + 2c\Delta x^2)\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right)_{i,i} + \dots \end{aligned} \quad (1-1-27)$$

比较式(1-1-27)左右两端，应有

$$a+b+c=0, \quad (b+2c)\Delta x=1, \quad \frac{1}{2}b\Delta x^2+2c\Delta x^2=0$$

由此可解出 $a=-\frac{3}{2\Delta x}$, $b=\frac{2}{\Delta x}$, $c=-\frac{1}{2\Delta x}$, 代入式(1-1-26)得

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{i,i} = \frac{1}{2\Delta x}(-3f_{i,i} + 4f_{i+1,i} - f_{i+2,i}) + E_{i,i} \quad (1-1-28a)$$

其中

$$E_{i,i} = -\frac{\Delta x^2}{3}\left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right)_{i,i} + \dots \quad (1-1-28b)$$

故有 $m=2$, 式(1-1-28)即为具有二阶精度的一阶导数的差分公式, 其截断误差 $E_{i,i}$ 为包含三阶导数的 Δx^2 量级的项。类似的方法还可求得具有二阶精度不同形式的一阶导数的差分公式

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{i,i} = \frac{1}{2\Delta x}(3f_{i,i} - 4f_{i-1,i} + f_{i-2,i}) + E_{i,i} \quad (1-1-29a)$$

其中

$$E_{i,i} = -\frac{\Delta x^2}{3}\left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right)_{i,i} + \dots \quad (1-1-29b)$$

类似地用这种一般方法可构造出具有四阶精度的一阶导数差分公式为

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right)_{i,i} = \frac{1}{12\Delta x}(-f_{i+2,i} + 8f_{i+1,i} - 8f_{i-1,i} + f_{i-2,i}) + O(\Delta x^4) \quad (1-1-30)$$

及具有四阶精度的二阶导数的差分公式为

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right)_{i,i} = \frac{1}{12(\Delta x)^2}(-f_{i+2,i} + 16f_{i+1,i} - 30f_{i,i} + 16f_{i-1,i} - f_{i-2,i}) + O(\Delta x^4) \quad (1-1-31)$$

实际应用中常常由于边界条件的精度限制, 以及考虑差分格式计算稳定性等原因, 使用高精度差分公式不一定能改善整个解式的精度, 通常仅应用二阶精度的差分公式。只有对函数有迅速变化的区域, 需要用更高精度的差分公式。如考虑下列波样运动的指数函数

$$f = \bar{f} e^{ikx} \quad (1-1-32)$$

其中, \bar{f} 为函数 f 的变动振幅, k 为波数。它的一阶导数为

$$\frac{df}{dx} = ikf \quad (1-1-33)$$

用中心差分求解式(1-1-32)的一阶导数

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_i &= \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} = \frac{\bar{f}}{2\Delta x} \left[e^{ik(x_i + \Delta x)} - e^{ik(x_i - \Delta x)} \right] \\ &= \bar{f} e^{ikx_i} \cdot \frac{1}{2\Delta x} (e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x}) = \frac{i \sin k\Delta x}{\Delta x} f_i \end{aligned} \quad (1-1-34)$$

比较式(1-1-33)和(1-1-34)可知, 只有当 $k\Delta x$ 很小时 (对大波长的指数函数), 中心差分才有好的近似性。将式(1-1-34)右端项用幂级数展开, 便有

$$\left(\frac{\delta f}{\delta x}\right)_i = ikf_i \left[1 - \frac{(k\Delta x)^2}{6} + O(k^4 \Delta x^4) \right] \quad (1-1-35)$$

故有差分与微分之间关系式:

$$\left(\frac{\delta f}{\delta x}\right)_i = \left[1 - \frac{(k\Delta x)^2}{6} + O(k^4 \Delta x^4) \right] \left(\frac{df}{dx}\right)_i \quad (1-1-36)$$

所以当函数 f 在作急速变化的短波运动区域, 即当 $k\Delta x$ 的量级为 1 时, 这时二阶精度的中心差分法会导致严重的误差, 而需要用更高精度的差分公式。

实际问题有时要求作不等距网格, 即使在等距网格划分中, 在边界附近亦会出现不等距网格点。对于不等距网格间距如图 1-1-3 所示。将离散点处函数 f_{i+1} 和 f_{i-1} 分别写出 f_i 处泰勒级数展开式, 通过这两个展开式分别消去 $\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_i$ 及 $\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_i$, 并令

图 1-1-3

$$s_i = \Delta x_i / \Delta x_{i-1} \quad (1-1-37)$$

解得

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_i = \frac{f_{i+1} + (s_i^2 - 1)f_i - s_i^2 f_{i-1}}{\Delta x_i (1 + s_i)} + E_i \quad (1-1-38a)$$

其中

$$E_i = -\frac{s_i(\Delta x_{i-1})^2}{6} \left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right)_i + O(\Delta x_{i-1}^3) \quad (1-1-38b)$$

按差分定义式有

$$\left(\frac{\delta f}{\delta x}\right)_i = \frac{f_{i+1} + (s_i^2 - 1)f_i - s_i^2 f_{i-1}}{\Delta x_i (1 + s_i)} \quad (1-1-39)$$

其截断误差 E_i 的量级为 $s_i \Delta x_{i-1}^2$, 显然, 当 $s_i = 1$ 时, 式(1-1-39)即为一阶导数的中心差分公式。及

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_i = \frac{f_{i+1} - (1 + s_i)f_i + s_i f_{i-1}}{\frac{1}{2}(1 + s_i)\Delta x_i \Delta x_{i-1}} + E_i \quad (1-1-40a)$$

其中

$$E_i = \frac{\Delta x_{i-1}(1 - s_i)}{3} \left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right)_i + O(\Delta x_{i-1}^2) \quad (1-1-40b)$$

按差分定义式有

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_i = \frac{f_{i+1} - (1 + s_i)f_i + s_i f_{i-1}}{\frac{1}{2}(1 + s_i)\Delta x_i \Delta x_{i-1}} \quad (1-1-41)$$

其截断误差 E_i 的量级为 $O[\Delta x_{i-1}(1 - s_i), \Delta x_{i-1}^2]$, 显然, 当 $s_i = 1$ 时, 式(1-1-41)即为二阶导数的中心差分公式。

由不等距差分公式的截断误差可见, 当 $s_i \neq 1$ 时, 其截断误差增大, 故不等距网格的精度一般比等距网格差, 特别是 s_i 很小时 (网格间距突然变化), 其精度更差。采用逐渐变化的网格间距, 可改善其精度, 如使

$$\Delta x_{i-1}(1 - s_i) = \Delta x_{i-1} - \Delta x_i = 0 \quad (1-1-42)$$