

# 计算气动声学

## 四. 空间离散格式

黄迅  
特聘研究员

力学与空天技术系  
工学院  
北京大学

[www.coe.pku.edu.cn/faculty/huangxun](http://www.coe.pku.edu.cn/faculty/huangxun)

感谢张欣教授提供原始素材，钟思阳帮助准备材料  
初稿，保留一切版权

## Introduction

计算声学(CAA)和计算流体力学(CFD)通过求解由偏微分方程组构成的控制方程来预测声场/流场的特性，二者的差异主要体现在：

- 声场能量和不稳定流动能量值差别巨大；

# Introduction

计算声学(CAA)和计算流体力学(CFD)通过求解由偏微分方程组构成的控制方程来预测声场/流场的特性，二者的差异主要体现在：

- 声场能量和不稳定流动能量值差别巨大；
- 声场传播和流体动力学中的特征长度不尽相同；

# Introduction

计算声学(CAA)和计算流体力学(CFD)通过求解由偏微分方程组构成的控制方程来预测声场/流场的特性，二者的差异主要体现在：

- 声场能量和不稳定流动能量值差别巨大；
- 声场传播和流体动力学中的特征长度不尽相同；
- 频率范围差异巨大(CAA处理的声波动问题频率宽得多)。

# Introduction

计算声学(CAA)和计算流体力学(CFD)通过求解由偏微分方程组构成的控制方程来预测声场/流场的特性, 二者的差异主要体现在:

- 声场能量和不稳定流动能量值差别巨大;
- 声场传播和流体动力学中的特征长度不尽相同;
- 频率范围差异巨大(CAA处理的声波动问题频率宽得多)。

为了准确计算声学现象, 因此需要发展更高数值精度、更小耗散(dissipation)和色散(dispersion)的数值格式。

# Introduction

计算声学(CAA)和计算流体力学(CFD)通过求解由偏微分方程组构成的控制方程来预测声场/流场的特性, 二者的差异主要体现在:

- 声场能量和不稳定流动能量值差别巨大;
- 声场传播和流体动力学中的特征长度不尽相同;
- 频率范围差异巨大(CAA处理的声波动问题频率宽得多)。

为了准确计算声学现象, 因此需要发展更高数值精度、更小耗散(dissipation)和色散(dispersion)的数值格式。

- 数值耗散(dissipation), 在CFD中会有助于数值计算的稳定性, 但是在CAA中会把声学小扰动量抹去;

# Introduction

计算声学(CAA)和计算流体力学(CFD)通过求解由偏微分方程组构成的控制方程来预测声场/流场的特性，二者的差异主要体现在：

- 声场能量和不稳定流动能量值差别巨大；
- 声场传播和流体动力学中的特征长度不尽相同；
- 频率范围差异巨大(CAA处理的声波动问题频率宽得多)。

为了准确计算声学现象，因此需要发展更高数值精度、更小耗散(dissipation)和色散(dispersion)的数值格式。

- 数值耗散(dissipation)，在CFD中会有助于数值计算的稳定性，但是在CAA中会把声学小扰动量抹去；
- 数值色散(dispersion)，会破坏声场各个谐波量之间的相位关系。

# Introduction

- 时间步进(Time Marching);
- 空间离散 (Spatial Discretisation);

例如:

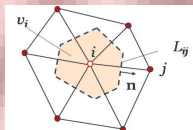
$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} = 0,$$

- $\partial u / \partial t$  对应于时间离散(time marching);
- $\partial u / \partial x$  对应于空间离散(spatial discretisation);
- 空间离散的方法有: 有限体积法(FVM)、有限元法(FEM)、有限差分法(FDM)。以下介绍CAA中主要的空间离散格式。



## 有限体积法

- FVM的基本步骤：
  - ▶ 将计算域划分为多个有限体积(控制体)；
  - ▶ 对每一个控制体使用积分形式的守恒关系；
  - ▶ 使用恰当的方法解这些关系式。
- 考虑2-D连续方程  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} = 0$ ，有



其中  $v_i$  为控制体， $L_{ij}$  为控制体边的长度， $\vec{n}$  为向外法向量。

## 有限体积法

- 对上述控制体写出守恒形式的积分方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dv + \oint_S \rho \vec{u} \cdot \vec{n} ds = 0, \quad (1)$$

此处S为控制体的表面， $\vec{n}$ 为控制体表面指向外面的法向量。

- 考虑如图所示的非结构型网格所定义的i节点，将其关于空间离散化后有关系式：

$$\frac{\partial \rho_i v_i}{\partial t} = - \sum_j L_{ij} \rho_i \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n}. \quad (2)$$

- 上述式子是FVM的一般形式， $v_i$ 代表控制体的体积， $L_{ij}$ 为相应的表面积。
- 一般来说，FVM的精度比较低( $\leq 2^{\text{nd}}$  order)，在CAA中用途不是很广。

# 有限元法

- FEM(Finite Element Method)是将计算空间离散成任意形状和大小的子元，所求解量用所谓的basis functions和周围的量线性组合而得

# 有限元法

- FEM(Finite Element Method)是将计算空间离散成任意形状和大小的子元，所求解量用所谓的basis functions和周围的量线性组合而得
- 如果 $\tilde{q}(x)$ 是 $q(x)$ 的近似解，那么 $\tilde{q}(x)$ 可以表示为：

$$\tilde{q}(x) = \sum_i q_i(x) N_i(x), \quad (3)$$

此处 $N_i(x)$ 为basis function;

# 有限元法

- FEM(Finite Element Method)是将计算空间离散成任意形状和大小的子元，所求解量用所谓的basis functions和周围的量线性组合而得
- 如果 $\tilde{q}(x)$ 是 $q(x)$ 的近似解，那么 $\tilde{q}(x)$ 可以表示为：

$$\tilde{q}(x) = \sum_i q_i(x)N_i(x), \quad (3)$$

此处 $N_i(x)$ 为basis function;

- FEM具有适用于非结构网格和易于拓展至高阶的特性；

# 有限元法

- FEM(Finite Element Method)是将计算空间离散成任意形状和大小的子元，所求解量用所谓的basis functions和周围的量线性组合而得
- 如果 $\tilde{q}(x)$ 是 $q(x)$ 的近似解，那么 $\tilde{q}(x)$ 可以表示为：

$$\tilde{q}(x) = \sum_i q_i(x)N_i(x), \quad (3)$$

此处 $N_i(x)$ 为basis function;

- FEM具有适用于非结构网格和易于拓展至高阶的特性；
- 在实际运用中，综合了FVM和FEM特性的discontinuous Galerkin(DG) method已经成功的用于求解N-S方程。

## 有限差分法

- FDM(Finite Difference Method)用网格节点上物理量来表示空间导数的值，其基础就是泰勒展开；
- 例子：一维连续方程

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (\text{where } q = \rho, f = \rho u), \quad (4)$$

对于 $\partial f/\partial t$ ，可分别使用如下两图所示的计算格式



- Explicit 3 points stencil with 2<sup>nd</sup> order:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = -\frac{1}{2\Delta x}(f_{k+1} - f_{k-1}) + o(\Delta x)^2. \quad (5)$$

Explicit 5 points stencil with 4<sup>th</sup> order:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = -\frac{1}{12\Delta x}(-f_{k+2} + f_{k-2} + 8f_{k+1} - 8f_{k-1}) + o(\Delta x)^4. \quad (6)$$

# 有限差分法

- FDM的误差是以 $O(\Delta x)^n$ 来衡量的，其中 $\Delta x$ 为空间步长， $n$ 为误差精度， $n$ 越大表示精度越高，具体取决于所用stencil和格式；
- 有限差分格式适用于结构网格；
- 有限差分格式很容易推广到高维情形；
- 提高计算精度无外乎：（1）提高 $n$ ；（2）减少 $\Delta x$ 。但减小 $\Delta x$ 的值意味着增加网格数目，会使得计算量大大增加，因此需要设计高精度格式；
- 在一般的CFD计算中2<sup>nd</sup>精度格式稳定性较好，同时又能提供足够的精度来模拟流动。但在CAA中为了准确模拟声学小量的发展过程需要使用高精度计算格式。



## 格式小结

- FDM只使用结构网格(Structural Grid System)，而FVM及FEM可适用非结构型网格，其中FEM的网格可以是任意大小和形状，因此后两个方法可以采用网格自动生成工具；
- 一般而言，FVM的精度较低( $\leq 2^{\text{nd}}$  order)，FEM及FDM都可以延展至高阶；
- FDM由于形式固定，容易延展至高阶精度，因此在CAA中常常使用此格式；
- FDM主要有显式格式和隐式(紧致)格式之分，在阶数越高时，显式格式会需要较大结点数目的stencil，隐式格式则可以用较小的stencil实现高阶格式。

## 空间离散有限差分格式

泰勒展开是有限差分格式的基础。空间离散一般主要有以下几种格式：

- 显式格式(Explicit Schemes):
  - ▶ 一阶导数;
  - ▶ 高阶导数;
  - ▶ 边条件的处理;
  - ▶ DRP方法 (关键是其思想)。
- 隐式格式(Implicit Schemes)。
- Prefactored compact scheme。

## 均匀性网格与非均匀性网格

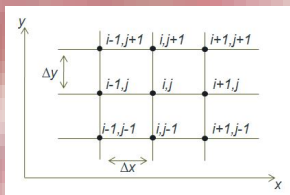
- 所谓均匀网格，是指在特定的方向上网格空间步长一定。



- 反之，则为非均匀网格。结构性的非均匀网格可以通过构造雅可比矩阵变换为均匀网格。
- 对于有限差分格式而言，因为其需要利用不同的结点来达到不同精度的格式，只需要知道结点之间的网格数以及步长即可。
- 结构性网格的优势在于推导比较容易，但是也制约了对于复杂形状的结构适应性。

## 泰勒展开(Taylor series expansion)

- 泰勒级数展开是有限差分格式的基础，通过使用物理量来代替偏导数项将偏微分方程转化成代数方程组。
- 考虑如下图所示的在直角坐标系下的均匀网格系统



- 对 $(i, j)$ 点和 $(i+k, j)$ 点的函数值，泰勒展开有：

$$f_{i+k,j} = f_{i,j} + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{i,j}(k\Delta x) + \frac{1}{2!}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_{i,j}(k\Delta x)^2 + \frac{1}{3!}\left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right)_{i,j}(k\Delta x)^3 + \dots + O(\Delta x)^n.$$

- 泰勒展开的精确性是由截断误差 $O(\Delta x)^n$ 来衡量的， $\Delta x$ 越小， $n$ 越大计算约精确。
  - ▶ 减小 $\Delta x$ 会大大增加计算时间；
  - ▶ 增加 $n$ 值—寻找高阶格式。

## 傅里叶误差分析(Fourier Error Analysis)

- 傅里叶误差分析在频域比较有限差分近似与原偏微分间的差异。
- 傅里叶误差分析包括以下几个步骤：
  - ▶ 确定原偏微分方程的波数关系；
  - ▶ 导出用有限差分格式近似的波数关系；
  - ▶ 比较确切波数关系和导出波数，二者越接近则格式性能越佳。
- 考虑一个周期性变化的函数 $f$ ，它的波数记为 $\alpha$ ，即有关系式

$$F\{f(x)\} = \tilde{f}(\alpha), \quad (7)$$

由傅里叶变换关系式有

$$F\{\partial f / \partial x\} = i\alpha \tilde{f}. \quad (8)$$

## 傅里叶误差分析

对有限差分格式推导波数关系，例如采用二阶中心差分格式：

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_i \approx \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta},$$

由傅里叶变换的性质

$$F\{f(x + j\Delta x)\} = e^{ij\alpha\Delta x}F\{f(x)\} = e^{ij\alpha\Delta x}\tilde{f}(\alpha),$$

对二阶中心差分格式两边作傅里叶变换有：

$$i\alpha\tilde{f} = \frac{1}{2\Delta x}(e^{i\alpha\Delta x} - e^{-i\alpha\Delta x})\tilde{f}(\alpha) = \frac{1}{2\Delta x}(2i\sin(\alpha\Delta x))\tilde{f}(\alpha).$$

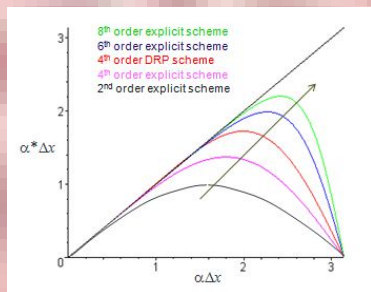
假设空间离散格式近似后的波数为 $\alpha^*$ ，我们有

$$\alpha^* = \frac{\sin(\alpha\Delta x)}{\Delta x}.$$

$\alpha^* \rightarrow \alpha$ ，当 $\alpha\Delta x \rightarrow 0$ 。

## 常见格式的傅里叶误差分析

- 由波数的定义 [在单位空间内出现的整波的次数 (不一定为整数)], 可知 $\alpha\Delta x$  是在一个波长内的空间网格数目的倒数;
- 在数值计算中,  $\alpha\Delta x$  越小, 即一个波长内网格数目越多, 计算越准确性, 色散越小;
- 高阶和DRP类的算法可以在较大的 $\alpha\Delta x$ 下仍然保持较好的准确性 ( $|\alpha - \alpha^*|$ 小), 说明可以用规模较小的网格。下面来详细讲讲来龙去脉。



## 一阶微分的近似

- 在泰勒级数展开公式中, 选取  $k = 1$ , 有  $(\frac{\partial f}{\partial x})_{i,j} = \frac{f_{i+1,j} - f_{i,j}}{\Delta x} - (\frac{\partial^2 f}{\partial x^2})_{i,j} \frac{\Delta x}{2} + \dots$ , 为一阶精度, 即

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

;

- 类似地, 选取  $k = -1$ , 有  $(\frac{\partial f}{\partial x})_{i,j} = \frac{f_{i,j} - f_{i-1,j}}{\Delta x} - (\frac{\partial^2 f}{\partial x^2})_{i,j} \frac{\Delta x}{2} + \dots$ , 也有

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

;

- 但是将上述两式联合, 有  $(\frac{\partial f}{\partial x})_{i,j} = \frac{f_{i+1,j} + f_{i-1,j} - 2f_{i,j}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)$ , 为二阶精度;
- 我们可以通过选取不同的  $k$  值进行线性组合来提高格式的精度。以下为了方便只考虑在  $x$  方向的离散格式推导, 其它维度的差分格式可相应推导。



## 扩展到高阶精度

- 考虑一阶微分近似表达为： $(\frac{\partial f}{\partial x})_i = \frac{1}{\Delta x} \sum_{j=-N}^M a_j f_{i+j} + O(\Delta x^P)$ ，由以下的推导可知， $P = M + N$ ;
- 对应的网格如下：



- 将每一个  $f_{i+j}$  使用泰勒展开，有

$$f_{i+j} = f_i + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_i (j\Delta x) + \frac{1}{2!} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_i (j\Delta x)^2 + \cdots + \frac{1}{(N+M)!} \left(\frac{\partial^{N+M} f}{\partial x^{N+M}}\right)_i (j\Delta x)^{N+M} + o(\Delta x)^{N+M+1}.$$

## 扩展到高阶精度

- 将各点的泰勒级数带入假设的微分表达式中，有：

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_i &= \frac{1}{\Delta x} [a_{-N}(f_i + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_i(-N\Delta x) + \frac{1}{2!}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_i(-N\Delta x)^2 + \cdots + \frac{1}{(N+M)!}\left(\frac{\partial^{N+M} f}{\partial x^{N+M}}\right)_i(-N\Delta x)^{N+M}) \\
 &+ a_{1-N}(f_i + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_i((1-N)\Delta x) + \frac{1}{2!}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_i((1-N)\Delta x)^2 + \cdots + \frac{1}{(N+M)!}\left(\frac{\partial^{N+M} f}{\partial x^{N+M}}\right)_i((1-N)\Delta x)^{N+M}) \\
 &+ \cdots \cdots \\
 &+ f_i \\
 &+ \cdots \cdots \\
 &+ a_{M-1}(f_i + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_i((M-1)\Delta x) + \frac{1}{2!}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_i((M-1)\Delta x)^2 + \cdots + \frac{1}{(N+M)!}\left(\frac{\partial^{N+M} f}{\partial x^{N+M}}\right)_i((M-1)\Delta x)^{N+M}) \\
 &+ a_M(f_i + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_i(M\Delta x) + \frac{1}{2!}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_i(M\Delta x)^2 + \cdots + \frac{1}{(N+M)!}\left(\frac{\partial^{N+M} f}{\partial x^{N+M}}\right)_i(M\Delta x)^{N+M})] + o(\Delta x^{M+N}).
 \end{aligned}$$

- 对不同阶次的导数合并同类项，可以得到 $N+M$ 个方程，同时也说明了阶次可以达到 $N+M$ 次。

## 扩展到高阶精度

- 合并后有

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_i &= \frac{1}{\Delta x} \left[ f_i \sum_{j=-N}^M a_j + \Delta x \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_i \sum_{j=-N}^M (j a_j) + \frac{(\Delta x)^2}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_i \sum_{j=-N}^M (j^2 a_j) \right. \\ &+ \dots + \frac{(\Delta x)^{M+N}}{(M+N)!} \left(\frac{\partial^{M+N} f}{\partial x^{M+N}}\right)_i \sum_{j=-N}^M (j^{M+N} a_j) \left. \right] + o(\Delta x^{M+N}). \end{aligned}$$

- 左右两端相等，则有：

$$\sum_{j=-N}^M a_j = 0, \sum_{j=-N}^M j a_j = 1, \sum_{j=-N}^M j^\alpha a_j = 0, \text{ where } \alpha = 3, 4, \dots, N + M.$$

- 恰好为一个  $N + M + 1$  个未知数， $M + N + 1$  个方程组成的线性方程组，而且其系数矩阵正好是范德蒙矩阵；
- 其中  $j$  取值从  $-N$  到  $M$  遍历，系数矩阵的行列式不为零，故只要给定  $M$  和  $N$ ，系数  $a_j$  ( $j = -N \dots M$ ) 就可以确定。

## DRP方法(Dispersion-Relation-Preserving Scheme)

- DRP方法(TAM 1993)是从傅里叶误差分析的角度出发,通过优化系数减少波数估计差异的方法。
- 记 $(\frac{\partial f}{\partial x})_i \approx \frac{1}{\Delta x} \sum_{j=-N}^M a_j f_{i+j}$ , 并且认为在节点*i*处时位于*x*处, 即

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x) \approx \frac{1}{\Delta x} \sum_{j=-N}^M a_j f(x + j\Delta x).$$

- 记函数*f*的傅里叶变换为 $\tilde{f}$ , 即 $F\{f(x)\} = \tilde{f}(\alpha)$ , 由傅里叶变换的性质有:  
 $F\{f(x + j\Delta x)\} = e^{i\alpha j\Delta x} \tilde{f}$ .
- 那么, 上述的等式两端的变为 $i\alpha \tilde{f} = (\frac{1}{\Delta x} \sum_{j=-N}^M a_j e^{i\alpha j\Delta x}) \tilde{f}$ .
- 因此新的波数 $\alpha^*$ 与旧的波数之间的关系为 $\alpha^* \Delta x = -i \sum_{j=-N}^M a_j e^{(ij\alpha \Delta x)}$ ,  
 $\alpha^* \Delta x$ 是关于 $\alpha \Delta x$ 以 $2\pi$ 为周期的函数。

## DRP方法(Dispersion-Relation-Preserving Scheme)

- DRP方法:定义一个误差函数E, 选择系数使得E的值最小:

$$E = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} |\alpha \Delta x - \alpha^* \Delta x|^2 d(\alpha \Delta x) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} |i\kappa - \sum_{j=-N}^M a_j e^{ij\kappa}|^2 d(\kappa)$$

- E值取最小的条件是  $\frac{\partial E}{\partial a_j} = 0$ , where  $j = -N, 1 - N, \dots, M - 1, M$
- 该方法可以和传统的泰勒级数的截断误差的方法联合,在  $N = M = 3$  时, 而且精确到4阶精度的话, 那么就只有一个自由变量, 假设为  $a_1$ , 带入式子  $\frac{\partial E}{\partial a_1} = 0$ , 就可以得到常用的4阶DRP方法的系数如下:

$$a_0 = 0$$

$$a_1 = a_{-1} = 0.79926643$$

$$a_2 = a_{-2} = -0.18941314$$

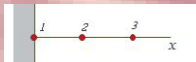
$$a_3 = a_{-3} = 0.02651995$$

- 关于一阶微分的近似的显示格式的方法同样可以推广到高阶导数的近似

# 边界公式

- 边界条件是偏微分方程非常重要的一部分，其对解空间的性质有着决定性的作用。
- 若是在某一结点的计算时需要用到的结点在计算区域之外，则必须对这些结点进行特殊的处理。
- 针对不同的问题，采用的边条件各不相同，例如有所谓的固壁条件(hard wall)、出流条件(outflow)、辐射条件(radiation)等等，对应的方程不尽相同。
- 对于边界上的空间导数的有限差分近似

- ▶ 对边界上的点( $i = 1$ )，只需考虑单边条件即可。如 $(\frac{\partial f}{\partial x})_1 = \frac{-3f_1+4f_2-f_3}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)$ ;



- ▶ 对于在边界处，使用格式一般形式会发生指标溢出的情况的点，如在上图中 $i = 3$ 时使用4th-order DRP方法，则需要使用到并不存在的 $f_0$ 的值，对于此类情况，可以考虑在这些结点改变格式的形式，如假设 $(\frac{\partial f}{\partial x})_3 = \sum_{j=-2}^4 a_j f_{3+j}$ .

## 隐式格式(Compact/Implicit Schemes)

- 隐式格式定义、举例；
- 显式格式与隐式格式之比较；
- 隐式格式的主要内容：
  - ▶ 一阶微分的隐式格式表达；
  - ▶ 二阶微分的隐式格式表达；
  - ▶ 紧致格式的发展；
  - ▶ 边条件处理。

## 显式格式与隐式格式之比较

- 对于使用相同的结点数目，隐式格式可以达到更高的精度；
- 显式格式可以直接求解每一个给定点的偏微分近似值；
- 隐式格式需要额外的求解线性方程组，计算量较大。



## 一阶微分的隐式格式表达

- 相比于显式格式，假设 $D_k$ 为结点 $k$ 处的一阶导数，隐式格式的一般形式为：

$$\sum_{j=-M}^M \beta_j D_{i+j} = \frac{1}{\Delta x} \sum_{k=-N}^N \alpha_k f_k, \text{ where } \beta_0 = 1, \beta_k = \beta_{-k}$$

- 等式的左边为 $2M + 1$ 个偏导数，表示为等式右边 $2N + 1$ 个结点处的函数值
- 该格式的精度会随 $M$ 或 $N$ 的增大而增大
- 由于考虑到线性方程求解的复杂性，常常取 $M \leq 2, N \leq 4$
- 将该式写成矩阵形式为 $[B]\{D\} = [C]\{F\}$ ，其中 $[B]$   $[C]$ 为系数矩阵。表示的是一个 $P$ 个未知数， $P$ 个方程的线性方程组，其中 $P$ 为该方向格点数目。

## 一阶微分的隐式格式表达

- 考虑一阶微分的隐式格式近似的一般情况形式,  $M \leq 2, N \leq 3$  (Lele1992)

$$\beta(D_{i-2} + D_{i+2}) + \alpha(D_{i-1} + D_{i+1}) + D_i = c \frac{(f_{i+3} - f_{i-3})}{6\Delta x} + b \frac{(f_{i+2} - f_{i-2})}{4\Delta x} + a \frac{(f_{i+1} - f_{i-1})}{2\Delta x}$$

- 系数  $\alpha, \beta, a, b, c$  可以通过泰勒级数的展开来得到
- $\beta \neq 0$  时 [B] 为五对角矩阵,  $\beta = 0$  时 [B] 最多为三对角阵,  $\alpha = \beta = 0$  时即为前述的显式格式
- 使用泰勒展开, 当  $k = \pm 1, \pm 2$   $l = \pm 1, \pm 2, \pm 3$  时

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{i+k} = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_i + \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_i (k\Delta x) + \cdots + \left(\frac{\partial^{11} f}{\partial x^{11}}\right)_i \frac{(k\Delta)^{10}}{10!} + O(\Delta x^{11})$$

$$f_{i+1} = f_i + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_i (l\Delta x) + \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_i \frac{(k\Delta x)^2}{2!} + \cdots + \left(\frac{\partial^{11} f}{\partial x^{11}}\right)_i \frac{(k\Delta)^{11}}{11!} + O(\Delta x^{11})$$

## 一阶微分的隐式格式表达

- 将前述式子带入隐式格式的一般表达式中，比较两端系数相等有

$$a + b + c = 1 + 2\alpha + 2\beta \quad (\text{二阶精度})$$

$$a + 2^2b + 3^2c = 2 \frac{3!}{2!} (\alpha + 2^2\beta) \quad (\text{四阶精度})$$

$$a + 2^4b + 3^4c = 2 \frac{5!}{4!} (\alpha + 2^4\beta) \quad (\text{六阶精度})$$

$$a + 2^6b + 3^6c = 2 \frac{7!}{6!} (\alpha + 2^6\beta) \quad (\text{八阶精度})$$

$$a + 2^8b + 3^8c = 2 \frac{9!}{8!} (\alpha + 2^8\beta) \quad (\text{十阶精度})$$

- 由方程组可知，该形式下的精度最多可以达到十阶。
- 在精度要求小于十阶时，方程组为不定方程组，可以选择适当的参数使情况格式形式简单

▶ 如 $\beta = c = 0$ 时， $a = \frac{2}{3}(\alpha + 2)$ ,  $b = \frac{1}{3}(4\alpha - 1)$ 是4阶精度格式

- 总而言之，选取不同的参数可以得到不同格式的不同阶数精度的有限差分格式

## 一阶微分的隐式格式傅里叶误差分析

- 对紧致(隐式)格式，同样的可以进行傅里叶误差分析，一些典型的结果波数关系如下

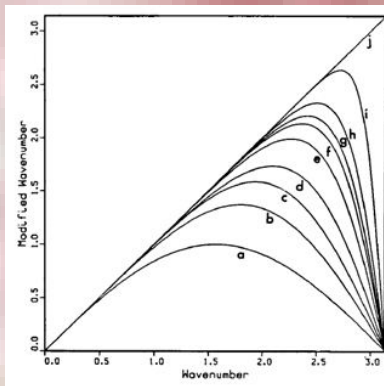


FIG. 1. Plot of modified wavenumber vs wavenumber for first derivative approximations: (a) second-order central differences; (b) fourth-order central differences; (c) sixth-order central differences; (d) standard Padé scheme ( $\beta=0=c$ ,  $\alpha=\frac{1}{2}$ ); (e) sixth-order tridiagonal scheme ( $\beta=0=c$ ,  $\alpha=\frac{1}{2}$ ); (f) eighth-order tridiagonal scheme ( $\beta=0$ ); (g) eighth-order pentadiagonal scheme ( $c=0$ ); (h) tenth-order pentadiagonal scheme; (i) spectral-like pentadiagonal scheme (3.1.6); (j) exact differentiation.

## 二阶微分的近似

- 对二阶微分的近似，同样的可以采取类似的方法，假设形式为

$$\beta(f_{i-2}'' + f_{i+2}'') + \alpha(f_{i-1}'' + f_{i+1}'') + f_i'' = c \frac{(f_{i+3} + f_{i-3} - 2f_i)}{9(\Delta x)^2} + b \frac{(f_{i+2} + f_{i-2} - 2f_i)}{4(\Delta x)^2} + a \frac{(f_{i+1} + f_{i-1} - 2f_i)}{(\Delta x)^2}$$

- 可以得到

$$\begin{aligned} a + b + c &= 1 + 2\alpha + 2\beta && \text{(二阶精度)} \\ a + 2^2b + 3^2c &= 2 \frac{4!}{2!} (\alpha + 2^2\beta) && \text{(四阶精度)} \\ a + 2^4b + 3^4c &= 2 \frac{6!}{4!} (\alpha + 2^4\beta) && \text{(六阶精度)} \\ a + 2^6b + 3^6c &= 2 \frac{8!}{6!} (\alpha + 2^6\beta) && \text{(八阶精度)} \\ a + 2^8b + 3^8c &= 2 \frac{10!}{7!} (\alpha + 2^8\beta) && \text{(十阶精度)} \end{aligned}$$

- 同样可以得到多种形式以及傅里叶误差分析的结果，此处不再细表

## 隐式格式的边条件处理

- 对于隐式格式而言，在离边界较近的地方，同样会有使用的结点溢出边界之外的情况。
- 一般而言，所采取的方法也和隐式格式类似，对结点处采用单边式子。如为一阶微分，假设：

$$f'_1 + \alpha f'_2 = \frac{af_1 + bf_2 + cf_3 + df_4}{\Delta x},$$

在四阶精度时，有  $\alpha = 3$ ,  $a = -\frac{6}{17}$ ,  $b = 1.5$ ,  $c = 1.5$ ,  $d = -\frac{1}{6}$ .

- 由于同一个由于方程两端同时乘以一个系数并不影响结果，常将边界处的方程乘以一个权重系数使与其他阶段满足守恒关系。用所得到的式子来定义全局的系数矩阵。详细请参考参考文献（Lele1992）。
- 对于二阶或者更高阶的情形，亦是类似处理。

## Prefactored Compact Scheme

- 如前所述，隐式/紧致格式有一个最大的缺点就是需要计算线性方程组。无疑，对于使用结点较多的格式，计算量是相当大的。
- 为了达到计算的精度，在边界处往往要选取大量的网格结点，这会对计算的稳定性有着显著的影响。
- Prefactored Compact Scheme方法首先由Hixon(Hixon 2000)提出，也是采用紧致格式的方法，但是通过巧妙的前处理，将原来比较难计算的线性方程组化成两个使用结点数较低，形式特殊、易于计算的方程组。
- 进一步的，优化Prefactored Compact Scheme(Ashcroft 2003)采用傅里叶分析的方法，用别于泰勒展开的方法来确定Prefactored Compact Scheme的系数。以下扼要介绍。

## Prefactored Compact Scheme

- 紧致格式的一般情形为  $[B]\{D\} = \frac{1}{\Delta x}[C]\{f\}$ .
- 对于四阶精度的格式，有  $\frac{1}{6}(D_{i+1} + D_{i-1}) + \frac{2}{3}D_i = \frac{1}{2\Delta x}(f_{i+1} - f_{i-1})$
- Prefactored Compact Scheme分别定义了向前(forward)和向后(backward)两个因子  $D^F$ 和  $D^B$ 使得  $D^F = \frac{1}{2}(D^B + D^F)$   
其中

$$[B^F]\{D^F\} = \frac{1}{\Delta x}[C^F]f, \quad [B^B]\{D^B\} = \frac{1}{\Delta x}[C^B]\{f\}$$

在满足  $[B^B][B^B]^T = [B^B]^T[B^B]$  时

$$[B^B][B^B]^T\{D\} = \frac{1}{2\Delta x}([B^B]^T[C^B] - [B^B][C^B]^T)\{f\}$$



## Prefactored Compact Scheme

- 假设 $B^F, B^B$ 和 $C^F, C^B$ 之间满足 $[B^F] = [B^B]^T, [C^F] = -[C^B]^T$
- 又假设 $B^F, C^F$ 满足如下关系式

$$aD_{i+1}^F + (1 - a - c)D_i^F + cD_{i-1}^F = \frac{1}{\Delta x} [bf_{i+1} - (2b - 1)f_i - (1 - b)f_{i-1}]$$

$$cD_{i+1}^F + (1 - a - c)D_i^F + aD_{i-1}^F = \frac{1}{\Delta x} [(1 - b)f_{i+1} + (2b - 1)f_i - bf_{i-1}]$$

显然满足 $[B^B][B^B]^T = [B^B]^T[B^B]$ 。

- 与四阶格式比较有： $a = \frac{1}{2} - \frac{1}{2\sqrt{3}}, b = 1, c = 0$ 是满足关系式的，显然这样的话，解线性方程组就容易多了。
- 其他阶数的格式，也可以使用类似的方法

## 优化Prefactored Compact Scheme

- 优化Prefactored Compact Scheme是从傅里叶误差分析的角度来确定形如Prefactored Compact Scheme的系数。
- 分别对向前( $D^F$ )和向后( $D^B$ )进行傅里叶误差分析, 对应的可以得到 $\alpha_F^* \Delta x$ 和 $\alpha_B^* \Delta x$ 与 $\alpha \Delta x$ 之间的关系。
- 由 $D = \frac{1}{2}(D^B + D^F)$ , 经过简单的推导, 有 $\alpha * \Delta x = \frac{1}{2}(\alpha_F^* \Delta x + \alpha_B^* \Delta x)$
- 定义误差函数 $\text{Err} = \int_0^{r\pi} (\alpha^* \Delta x - \alpha \Delta x)^2 W(\alpha \Delta x) d(\alpha \Delta x)$ , 其中 $r$ 和 $W$ 分别为范围因子(range factor)和权函数(weighting function)
- 最后通过下式来确定参数

$$\frac{\partial \text{Err}}{\partial \eta_i} = 0$$

其中 $\eta_i$ 为假定的形式中的自由参数



CHRISTOPHERE K TAM AND JAY C WEBB.

Dispersion-Relation-Preserving Finite Difference Schemes for Computational Acoustics,

JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS 107, 262-281(1993).



SANJIVA K.LELE.

Compact Finite Schemes With Spectral-like Resolution,

JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS 103, 16-42(1992).



R.Hixon

Prefactored Small-Stencil Compact Schemes,

Journal Of Computational Physics 165, 522-541(2000).



Graham Ashcroft,Xin Zhang

Optimized Prefactored Compact Schemes,

Journal Of Computational Physics 190(2003)459-477.