ⓒ 应用数学和力学编委会, ISSN 1000-0887
http://www.applmathmech.cn

有限差分法计算热传导方程的几何诱导误差*

刘　君[1]，　刘光英[2]，　徐春光[2]

（1. 宁波大学 机械工程与力学学院，浙江 宁波 315211；
2. 中山大学 航空航天学院，广州 510275）

摘要： 首先举例说明，基于离散等价方程提出了非结构网格有限差分法（UFDM），提高了有限差分法几何适应性．在有限差分法求解曲线坐标系下热传导方程时，坐标变换导致出现几何诱导误差．这一现象通过采用中心格式求解温度场方程给出说明．根据差分格式截断误差的精度定义，理论上论证了几何诱导误差导致降阶的必然性．其次提出了验证一阶精度的保线性考核模型，据此得出了差分格式在非均匀网格难以保证考核模型一阶精度的结论．在此基础上，提出了基于梯度重构的保线性算法．数值计算表明，对任意形状结构网格计算线性分布温度场，均可得到误差为机器精度 0 量级的数值解，为开发全自动温度场计算软件提供了理论与实践基础．

关　键　词： 有限差分法；　热传导方程；　贴体坐标系；　精度评估；　验证与确认
中图分类号： O35　　**文献标志码：** A　　DOI：10.21656/1000-0887.460061

Geometrically-Induced Errors in the Finite Difference Method for Solving Heat Conduction Equations

LIU Jun[1]，　LIU Guangying[2]，　XU Chunguang[2]

（1. *Faculty of Mechanical Engineering and Mechanics*, *Ningbo University*, *Ningbo*, *Zhejiang* 315211, *P.R.China*;
2. *School of Aeronautics and Astronautics*, *Sun Yat-sen University*, *Guangzhou* 510275, *P.R.China*）

Abstract: Firstly, as an example, the unstructured finite difference method (UFDM) based on discrete equivalent equations was proposed, to enhance the geometric adaptability of the finite difference method. During the solution of the heat conduction equations with the finite difference method in the curvilinear coordinate system, the coordinate transformation will lead to geometric-induced errors. This phenomenon was illustrated by means of the central difference scheme to solve the temperature field equation. Based on the precision definition of the truncation errors of the difference scheme, the geometry-induced error was theoretically demonstrated to inevitably leads to a reduction in order. Secondly, a linear preservation assessment model was built to verify the 1st-order accuracy, and the difference scheme was proved to be difficult to guarantee the 1st-order accuracy of the assessment model on non-uniform grids. On this basis, a linear preservation algorithm based on gradient reconstruction was proposed. Numerical calculations show that, for structured grids with any shape to calculate linearly distributed temperature fields, numerical solutions with errors at the machine precision level of 0 can be obtained. This study provides a theoretical and practical foundation for developing fully automatic temperature

* **收稿日期：** 2025-04-02；**修订日期：** 2025-06-10
作者简介： 刘君（1965—），男，教授，博士，博士生导师（通信作者. E-mail：liujun65@dlut.edu.cn）.
引用格式： 刘君，刘光英，徐春光. 有限差分法计算热传导方程的几何诱导误差[J]. 应用数学和力学，2026，**47**(2)：219-229.

field calculation software.

Key words: finite difference method; heat conduction equation; body-fitted coordinate system; accuracy assessment; verification and validation

0 引 言

从 CAE 发展历史来看,早期均经历过有限差分法(FDM)阶段,但是目前流行的商业软件大多采用有限元法(FEM)或者有限体积法(FVM)编写,普遍认为造成这种局面的原因在于 FDM 只能采用结构网格计算,难以处理工程应用中遇到复杂几何构成的计算域.且有限差分法在处理边界问题时,存在明显的精度降阶问题,导致其在计算边界的数值结果达不到预期效果.对于采用有限差分法求解复杂几何边界问题时,一种做法是采用浸入边界法(immersed boundary method, IBM)[1].浸入边界法允许将复杂边界"浸入"到一个简单的背景网格中(通常是规则的 Descartes 网格),从而避免了复杂的网格生成过程,提高了计算效率和灵活性,特别适合那些边界动态变化或几何结构复杂的应用场景[2-3].然而,其精度仍受限于插值方法和背景网格的分辨率,难以完全消除边界处的数值误差.刘君课题组基于离散等价方程提出非结构网格有限差分法(UFDM)[4],提高了传统 FDM 几何适应性.例如,模拟图 1 所示两个物体外侧的流场,采用 FEM 和 FVM 需要消除细缝,得到外表面封闭的水密模型,才能开始物面和空间的网格生成.对基于空间点构建的 FDM 来说,物面点 i 和 j 之间关联性不影响内流场计算,因此,理论上不需要进行几何清理,应用中也已经实现"输入 CAD 输出 CFD"的全自动功能,图 2 演示了 UFDM 的几何友好和实时仿真能力.

为提高 UFDM 计算效率,刘君课题组发展出扎染算法[5],正在此基础上研制全自动流场仿真软件,图 2 采用的是基于扫描点云的模型,模型附近是采用非结构网格计算得到的结果.对于静止物体,3D 激光扫描精度可以达到 10^{-2} mm 量级,由于扫描过程中手有微小颤抖,得到的点云几何模型存在明显缺陷.扫描现场采用扎染算法模拟,在常规笔记本电脑计算环境下,采用百万量级的网格规模模拟手模型周围的超声速绕流,计算 20 分钟得到大致收敛结果,如图 2 中的密度云图,清晰捕捉到激波等流场结构.

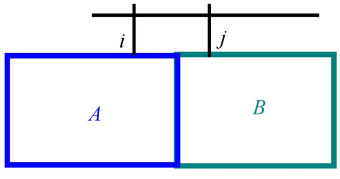

图 1 非水密几何的差分示意

Fig. 1 Schematic of differential for non-water-tight geometry

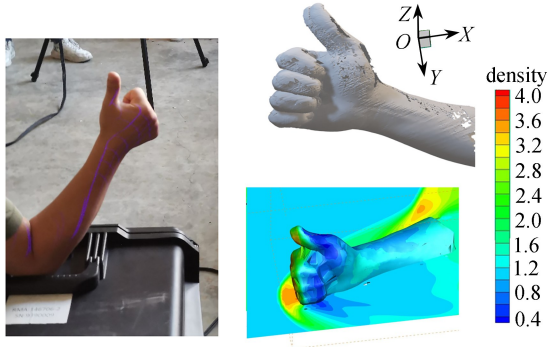

图 2 基于点云的扎染算法全自动流场仿真演示

Fig. 2 Demonstration of fully automatic flow field simulation based on point cloud for the tie-dye algorithm

注 为了解释图中的颜色,读者可以参考本文的电子网页版本,后同.

目前 CAE 仿真过程中网格生成严重依赖 CAD 平台,自动驾驶、机器人等领域越来越多使用基于像素或点云的离散几何模型,多年来希望出现类似于照相机领域内数字技术代替模拟技术的柯达时刻(Kodak moment),结束 CAD 统治(the tyranny of CAD)局面[6].从图 2 仿真演示看,UFDM 和扎染算法已经完全具备这种能力.另一方面,UFDM 的缺点也很明显,主要体现在使用高精度格式时计算量大幅增加.在非结构网格中,网格线的连接关系较为复杂,需要进行多重映射来满足曲线局部坐标系下的结构网格坐标轴需求,这会增加计算的复杂性和时间成本.非结构网格的差分法在应用时,在离散点以外的相邻网格上,通量分裂的计算表达式与经典方法相比,明显增加了计算量[4-5].同时不可忽视的是,当流场中存在激波相交等复杂物理现象,应用 UFDM 同样也会遇到困难,影响计算精度,这是后续 UFDM 研究需要关注和解决的问题.

在计算流体力学领域,流场仿真通常基于具有空间一阶导数的守恒型 Euler 方程.本文将非结构 UFDM 拓展应用于包含空间二阶导数的热传导方程,旨在探索其在这类方程求解中的有效性与精度表现.研究发现,即使对于非守恒型热传导方程,在采用有限差分法进行数值求解时,几何诱导误差同样会导致数值精度的降低.这一现象表明,几何诱导误差对数值模拟精度的影响具有一定的普适性,不局限于特定类型的方程或计算方法.

1　坐标变换引起的几何诱导误差

在有限差分法领域,普遍采用时间相关法,尽管本文讨论定常问题的空间离散格式,依然从包含时间项的非定常热传导方程出发.为避免和时间变量混淆,采用 u 表示温度参数,计算热传导系数为常数的定常问题,热传导系数不影响温度分布特性,二维热传导方程的初边值问题在 Descartes 坐标系的形式如下:

$$\begin{cases}\dfrac{\partial u}{\partial t}=\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}, & 0<x<1,\ 0<y<1,\ 0<t\leqslant T,\\ u\big|_{t=0}=0, & 0<x<1,\ 0<y<1,\\ u\big|_{x=0}=0,\ u\big|_{x=1}=1, & 0<y<1,\ 0<t\leqslant T.\end{cases}\tag{1}$$

采用坐标变换从物理空间 (x,y) 映射到计算空间 (ξ,η), 先求一阶导数:

$$\begin{cases}\dfrac{\partial}{\partial x}=\xi_x\dfrac{\partial}{\partial \xi}+\eta_x\dfrac{\partial}{\partial \eta},\\ \dfrac{\partial}{\partial y}=\xi_y\dfrac{\partial}{\partial \xi}+\eta_y\dfrac{\partial}{\partial \eta},\end{cases}\tag{2}$$

式中变换函数的一阶导数和 Jacobi 表达式如下:

$$\begin{cases}\xi_x=y_\eta J,\ \xi_y=-x_\eta J,\\ \eta_x=-y_\xi J,\ \eta_y=x_\xi J,\end{cases}\qquad J^{-1}=\left|\frac{\partial(x,y)}{\partial(\xi,\eta)}\right|=(x_\xi y_\eta-x_\eta y_\xi).\tag{3}$$

在此基础上,根据链式法则,得到二阶导数:

$$\begin{cases}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}=\xi_{xx}\dfrac{\partial}{\partial \xi}+\eta_{xx}\dfrac{\partial}{\partial \eta}+(\xi_x)^2\dfrac{\partial^2}{\partial \xi^2}+2\xi_x\eta_x\dfrac{\partial^2}{\partial \xi\partial \eta}+(\eta_x)^2\dfrac{\partial^2}{\partial \eta^2},\\ \dfrac{\partial^2}{\partial y^2}=\xi_{yy}\dfrac{\partial}{\partial \xi}+\eta_{yy}\dfrac{\partial}{\partial \eta}+(\xi_y)^2\dfrac{\partial^2}{\partial \xi^2}+2\xi_y\eta_y\dfrac{\partial^2}{\partial \xi\partial \eta}+(\eta_y)^2\dfrac{\partial^2}{\partial \eta^2},\end{cases}\tag{4}$$

式中用到变换函数的二阶导数表达式如下:

$$\begin{cases}\xi_{xx}=J^2\{y_\eta y_{\eta\xi}+J^{-1}(y_\eta)^2J_\xi-y_\xi y_{\eta\eta}+J^{-1}y_\xi y_\eta J_\eta\},\\ \xi_{yy}=J^2\{x_\eta x_{\xi\eta}+J^{-1}(x_\eta)^2J_\xi-x_\xi x_{\eta\eta}-J^{-1}x_\eta x_\xi J_\eta\},\\ \eta_{xx}=J^2\{-y_{\xi\xi}y_\eta-J^{-1}y_\xi y_\eta J_\xi+y_{\eta\xi}y_\xi+J^{-1}(y_\xi)^2J_\eta\},\\ \eta_{yy}=J^2\{-x_{\xi\xi}x_\eta-J^{-1}x_\xi x_\eta J_\xi+x_{\xi\eta}x_\xi+J^{-1}(x_\xi)^2J_\eta\},\end{cases}\tag{5}$$

其中

$$\begin{cases}J_\xi=-J^2(x_{\xi\xi}y_\eta+x_\xi y_{\eta\xi}-x_{\eta\xi}y_\xi-x_\eta y_{\xi\xi}),\\ J_\eta=-J^2(x_{\xi\eta}y_\eta+x_\xi y_{\eta\eta}-x_{\eta\eta}y_\xi-x_\eta y_{\xi\eta}).\end{cases}\tag{6}$$

根据以上变换关系,能够得到在计算空间 (ξ,η) 表示的方程形式:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t}=&(\xi_{xx}+\xi_{yy})\frac{\partial u}{\partial \xi}+(\eta_{xx}+\eta_{yy})\frac{\partial u}{\partial \eta}+[(\xi_x)^2+(\xi_y)^2]\frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2}+\\ &2(\xi_x\eta_x+\xi_y\eta_y)\frac{\partial^2 u}{\partial \xi\partial \eta}+[(\eta_x)^2+(\eta_y)^2]\frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2}.\end{aligned}\tag{7}$$

客观存在的物理现象及其状态参数不应随坐标系的改变而变化.将方程从 Descartes 坐标系变换到贴体坐标系后,尽管其数学形式可能不同,但两者在数学本质是等价的.然而,后续的算例表明,对于相同的物理

问题,在不同网格下的计算结果并不一致.这种由于坐标变换或网格变化所引起的误差,被称为几何诱导误差(geometrically induced errors)[7].在 20 世纪 70 年代,Steger 等[8]利用 Euler 方程,在曲线坐标系中对一个全场参数均为常数的理想均匀流场进行了模拟.然而,实验结果揭示了质量不守恒的现象,这一发现突显出差分格式中存在几何诱导误差问题.这种误差源于坐标变换或网格生成过程中引入的非物理性偏差,它促使学者们开始探索如何修正数值方法以准确捕捉物理现象的本质.为了解决这个问题并确保数值模拟能够真实反映物理量的守恒性质,研究者们发展了一个新的概念——几何守恒律(geometric conservation law, GCL).GCL 旨在通过严格的数学框架来消除或至少最小化由几何因素导致的误差,从而保证即使在复杂的非 Descartes 网格上进行计算时,也能维持基本物理量如质量、动量和能量的守恒特性[9].Deng 等[10]针对 WCNS 格式提出对称守恒算法(symmetry conservative metric method, SCMM),解决了中心型格式的自由流问题.对于包含迎风型模板或者限制器,例如 TVD、MUSCL、WENO 等非线性格式,格式随着流场计算变化,目前只能借鉴 SCMM 思路构造出减小误差的 GCL 算法[11-12],还不能完全消除.

Euler 方程属于非线性双曲型方程,为了捕捉流场中的激波间断,需要采用守恒型.几何诱导误差源自坐标变换系数导数的离散过程,从数学角度可以采用如下解释:

在连续空间上组合函数求导满足恒等式

$$\frac{\partial(\xi_x u)}{\partial \xi} = \xi_x \frac{\partial u}{\partial \xi} + u \frac{\partial \xi_x}{\partial \xi}, \tag{8}$$

在离散空间上采用差分算子 δ 代替导数,如果坐标变换系数导数 ξ_x 和流场变量 u 其中之一不是常数,会出现不等式关系

$$\delta_\xi(\xi_x u) \neq \xi_x \delta_\xi(u) + u\delta_\xi(\xi_x), \tag{9}$$

因此在离散过程中就会引入几何诱导误差.

研究几何守恒律算法的核心目标在于确保式(9)在离散空间中成立.所谓自由流保持特性(freestream preservation),即在计算域内所有变量均为常数的理想流场中,数值解的误差应严格收敛至及机器精度的零.GCL 的本质是通过构建与差分格式相匹配的坐标变换系数计算方法,实现该物理守恒性质的严格保持.对热传导方程而言,由于其物理本质决定了温度场不会形成间断面,且控制方程本身为非守恒型偏微分方程,因此,传统 CFD 领域基于守恒型方程的 GCL 理论框架并不直接适用.文献调研显示,当前尚未发现针对热传导方程的 GCL 算法研究,也未见关于其几何诱导误差的系统性分析.值得注意的是,尽管热传导方程本身不依赖守恒形式,但在采用有限差分方法对空间二阶导数进行离散化处理时,尤其是在非结构化网格或贴体坐标系下,仍可能存在显著的几何诱导误差.这种误差源于网格几何参数在离散过程中的近似处理,其影响机制与计算流体力学中的质量不守恒现象具有本质相似性.以下通过典型的一维算例进一步验证该现象,并探讨其对数值精度的影响程度.

考虑到后面的算例和云图显示方便,编写二维程序计算一维问题.由于 y 方向导数为 0,计算空间上的方程退化为

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \xi_{xx} \frac{\partial u}{\partial \xi} + (\xi_x)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2}. \tag{10}$$

采用中心格式得到半离散方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \xi_{xx} \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta\xi} + \xi_x^2 \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{(\Delta\xi)^2} = \xi_{xx}\delta_\xi^{(2)} + (\xi_x)^2 \delta_{\xi\xi}^{(2)}. \tag{11}$$

由于编程采用整数编码标识离散网格点,对任何变换函数,最终映射到计算空间上形成的网格是均匀的,即 $\Delta\xi = 1$.式中用到的坐标变换导数 ξ_x 和 ξ_{xx} 采用数值解得到

$$\xi_x|_i = \frac{1}{x_\xi|_i} = \frac{2}{x_{i+1} - x_{i-1}},\ \xi_{xx} = \frac{\xi_x|_{i+1} - \xi_x|_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}}, \tag{12}$$

在均匀网格上有 $\xi_x = 1/\Delta x$ 和 $\xi_{xx} = 0$, 差分方程进一步退化为

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

非定常热传导方程属于抛物型，稳态解对应椭圆型.数理方程理论证明，在合适初边值条件下，该问题存在唯一解.这一适定性是构建数值算法的基础.对于差分格式对应的修正方程，尽管未严格证明其适定性，但其隐含相同适定性特性.依据适定性理论推论，若存在同时满足原始方程与修正方程的温度场，则系统收敛后数值解误差趋近于零.这一结论依赖于修正方程保留物理本质特性及截断误差的渐近消散性，为评估复杂几何问题的数值精度提供了理论依据.由于存储字长有限，计算机不存在严格的数学相等，误差为 0 只能是机器精度的 0.由 IEEE754 标准，单精度为小数点后 7 位为准确数字，双精度为小数点后 15～16 位为准确数字，即误差显示为 10^{-7}（单精度）或 10^{-15}（双精度）量级.本文采用双精度，误差量级不随网格改变作为机器精度零的评价标准.

采用伪时间步进法求解定常问题时，将收敛标准设为接近机器精度的误差阈值.采用节点数分别为 21×21，41×41，81×81 和 161×161 共 4 套网格.根据线性分布 $u=x$ 给定左右两侧边界条件，上下边界条件采用外推得到.在 4 套均匀网格上计算的误差结果分布类似于图 3，可以认为达到了机器精度的 0 误差量级，即数值解等于离散的理论解.其次，将中间的网格线移动微小距离 $\kappa\Delta x$.如图 4 所示，图中蓝色线段表示原来均匀网格点所在的位置，红色线段表示轻微挪动后的非均匀网格点所在位置.挪动后四套网格上计算结果都出现了误差，图 5 是变化最小（$\kappa=10^{-5}$）、最细网格上（161×161）的误差分布.图 6 是最细网格 $\Delta x=0.006\,25$ 上误差随扰动系数变化的曲线.从结果上来看，即使扰动为网格步长的 10^{-5}，仍然产生量级远高于机器精度零的误差.

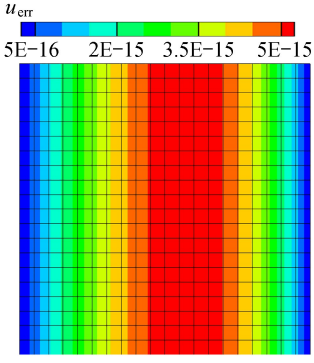

图 3　均匀网格误差

Fig. 3　Uniform grid errors

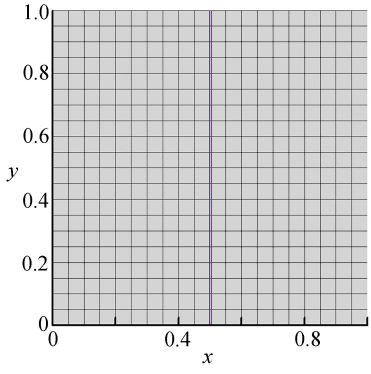

图 4　挪动一列点后的非均匀网格

Fig. 4　The non-uniform grid after shifting a column of points

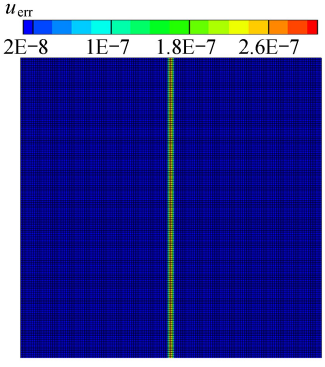

图 5　非均匀网格误差

Fig. 5　Errors of the non-uniform grid

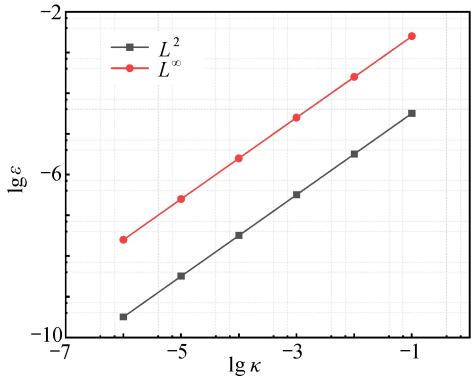

图 6　网格扰动系数引起的误差变化

Fig. 6　Error variations caused by grid disturbance coefficients

根据图 6 的变化曲线可以发现，在 x 方向对其中一点网格做轻微扰动后，仍然出现量级远高于机器精度零并对网格尺度敏感的误差.因此，非均匀网格经过坐标变换后到计算空间必然出现不可忽视的几何诱导误差.另一方面，考虑到以上计算中坐标变换系数导数采用差商近似，而且变换函数的导数不连续，理论上会引

入误差.为排除这个因素,采用无穷阶导数连续的柱坐标变换:

$$\begin{cases}\xi=\xi(r),\\ \eta=\eta(\theta),\end{cases}\quad\begin{cases}r=\sqrt{x^2+y^2},\\ \theta=\arctan(x/y),\end{cases}\quad\begin{cases}x=r\sin\theta,\\ y=r\cos\theta.\end{cases}\tag{14}$$

为避免圆心的奇性,计算区域取圆环,如图 7 所示.内外边界固定为线性分布的解析解,计算中坐标变换系数导数采用理论值,误差云图为图 8,同样存在远大于机器精度表示为 0 的误差,表明即使坐标变换系数及其导数采用准确的理论离散值,也无法消除非均匀网格上的几何诱导误差.

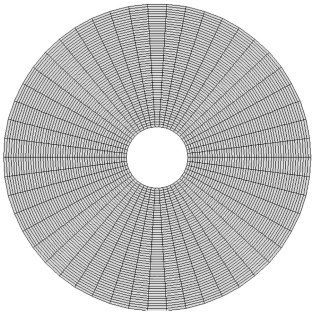

图 7 圆柱坐标网格

Fig. 7 The cylindrical coordinate grid

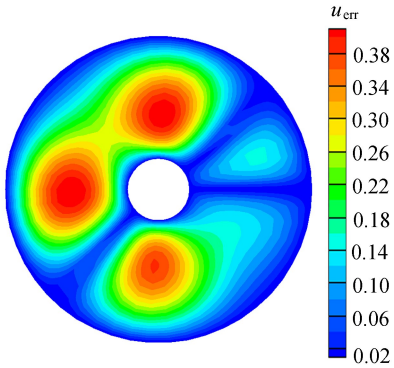

图 8 圆柱网格误差

Fig. 8 Errors of the cylindrical grid

2 几何诱导误差引起精度降阶现象

在物理空间上的 Taylor 级数:

$$u_{i\pm1}=u_i+\sum_{n=1}^{\infty}(\pm\Delta x)^n\frac{1}{n!}\left(\frac{\partial^n u}{\partial x^n}\right)_i,\tag{15}$$

代入差分格式,得到等价的修正方程,根据截断误差首项网格尺度的量级定义格式空间精度为 p 阶.例如,以上中心差分格式在均匀网格上修正方程为

$$\frac{1}{(\Delta x)^2}(u_{i+1}-2u_i+u_{i-1})=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{1}{24}(\Delta x)^2\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}+\cdots,\tag{16}$$

可知式(16)为二阶精度.尽管无法证明计算空间中如下级数的收敛性,按照相容性分析过程,直接套用 Taylor 级数展开表达式,得

$$u_{i\pm1}=u_i+\sum_{n=1}^{\infty}(\pm\Delta\xi)^n\frac{1}{n!}\left(\frac{\partial^n u}{\partial\xi^n}\right)_i=u_i+\sum_{n=1}^{\infty}(\pm1)^n\frac{1}{n!}\left(\frac{\partial^n u}{\partial\xi^n}\right)_i.\tag{17}$$

代入中心差分格式 $\delta_\xi^{(2)}(u)$ 和 $\delta_{\xi\xi}^{(2)}(u)$,得到对应的修正方程,写出截断误差首项:

$$\delta_{\xi\xi}^{(2)}(u)=\frac{\partial^2 u}{\partial\xi^2}+\frac{1}{24}\frac{\partial^4 u}{\partial\xi^4}+\cdots,\tag{18}$$

$$\delta_{\xi}^{(2)}(u)=\frac{\partial u}{\partial\xi}+\frac{1}{12}\frac{\partial^3 u}{\partial\xi^3}+\cdots.\tag{19}$$

由于式中没有显式出现网格尺度 Δx,无法根据其定义量级给出格式精度定义.因此,有必要逆变换回到物理空间.根据链式法则,在计算空间和物理空间之间变量 u 导数关系为

$$\begin{cases}\dfrac{\partial u}{\partial\xi}=\dfrac{1}{\xi_x}\dfrac{\partial u}{\partial x}=x_\xi\dfrac{\partial u}{\partial x},\ \dfrac{\partial^2 u}{\partial\xi^2}=x_{\xi\xi}\dfrac{\partial u}{\partial x}+(x_\xi)^2\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2},\\ \dfrac{\partial^3 u}{\partial\xi^3}=x_{\xi\xi\xi}\dfrac{\partial u}{\partial x}+3x_{\xi\xi}x_\xi\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}+(x_\xi)^3\dfrac{\partial^3 u}{\partial x^3},\\ \dfrac{\partial^4 u}{\partial\xi^4}=x_{\xi\xi\xi\xi}\dfrac{\partial u}{\partial x}+[4x_{\xi\xi\xi}x_\xi+3(x_{\xi\xi})^2]\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}+6x_{\xi\xi}(x_\xi)^2\dfrac{\partial^3 u}{\partial x^3}+(x_\xi)^4\dfrac{\partial^4 u}{\partial x^4}.\end{cases}\tag{20}$$

代入计算空间差分方程,得到物理空间的表达式:

$$\xi_{xx}\delta_{\xi}^{(2)} + (\xi_x)^2\delta_{\xi\xi}^{(2)} = \left[\xi_{xx}\left(x_{\xi} + \frac{x_{\xi\xi\xi}}{12}\right) + (\xi_x)^2\left(x_{\xi\xi} + \frac{x_{\xi\xi\xi\xi}}{24}\right) + \cdots\right]\frac{\partial u}{\partial x} + \left[\xi_{xx}\left(\frac{x_{\xi\xi}x_{\xi}}{4}\right) + 1 + (\xi_x)^2\left(\frac{4x_{\xi\xi\xi}x_{\xi} + 3(x_{\xi\xi})^2}{24}\right) + \cdots\right]\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \left[\xi_{xx}\frac{(x_{\xi})^3}{12} + (\xi_x)^2\frac{x_{\xi\xi}(x_{\xi})^2}{4} + \cdots\right]\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \frac{(x_{\xi})^4}{24}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \cdots. \tag{21}$$

可以看出二阶导数前系数发生了变化,还出现了关于 x 的一阶导数.计算空间上高阶导数包含物理空间低阶导数.在 $\Delta x_i \neq \Delta x_{i-1}$ 非均匀网格的条件下有 $\xi_{xx} \neq 0$, 出现差分格式的几何诱导误差导致精度降阶的问题.

3　热传导方程的保线性算法

以上计算结果分析表明:差分格式的几何诱导误差导致降阶是普遍存在的数值现象,为何没有引起关注? 笔者认为:目前差分格式研究中采用网格收敛测试评价精度的做法掩盖了这个问题.由于绝大部分工程问题没有理论解,通常根据数值解随网格的变化规律来估算误差.假设误差 $\varepsilon = u^c - u$ 和网格尺度 Δx 之间可以写成如下多项式:

$$\varepsilon = \sum_{m=q+1} \alpha_x^m (\Delta x)^{m-1}. \tag{22}$$

忽略高阶小量,仅保留首项 $\varepsilon \approx \alpha(\Delta x)^q$, 上式近似为

$$\lg \varepsilon = q\lg(\Delta x) + \lg \alpha. \tag{23}$$

采用平分策略加密网格,两套网格尺度之间 $\sigma = \Delta x_1/(\Delta x_2) = 2$, 得到误差后可以求出

$$q = \frac{\lg \varepsilon_1 - \lg \varepsilon_2}{\lg(\Delta x_1) - \lg(\Delta x_2)} = \frac{\lg(\varepsilon_1/\varepsilon_2)}{\lg \sigma}. \tag{24}$$

精度测试方法中把 q 称为网格收敛阶数,用来评价差分格式的精度.

在以上 4 套均匀分布网格上,根据分布 $u_{ij} = (e^x \sin y)_{ij}$ 给定边界分布.计算误差范数见表 1,采用对数坐标画出误差网格变化曲线如图 9,根据斜率,无穷范数收敛阶为二阶,2 范数收敛阶为三阶,与所采用的二阶精度中心格式基本符合.由此也可以合理解释前面图 6 中的收敛阶.

表 1　网格加密引起的误差

Table 1　Errors caused by the grid refinement

Δx	$\varepsilon(L^2)$	$\varepsilon(L^\infty)$
0.05	6.29E-7	2.60E-5
0.025	8.26E-8	6.53E-6
0.012 5	1.06E-8	1.63E-6
0.006 25	1.34E-9	4.09E-7

网格收敛精度和差分格式精度相比,前者针对求解变量,后者针对变量导数,数学性质完全不同.刘君课题组在柱坐标网格上模拟自由流[13],对出现的几何诱导误差进行网格收敛精度,根据测试曲线得出结论是:一阶迎风格式为二阶,五阶 WENO 不到一阶.使用如图 3 的四套网格误差结果,得到的误差曲线不随网格变化,无法按照网格收敛精度评价阶数.但是,其误差数量级远远小于图 6 曲线误差 2 范数评价为三阶精度的情况.

认识到网格收敛精度和差分格式精度存在差异,本文提出采用保线性考核模型来评估算法精度.对于均匀网格,任何一阶精度及以上的差分格式,其截断误差的首项为二阶导数.理论上,计算线性分布温度场,误差应为零;实际应用中,则以机器精度为标准进行验证.若算法误差能达到机器精度,表明其通过一阶精度考核,具备保线性特性.反之,若计算误差显著高于机器精度,并且随网格变化而变化,则依据工程领域通用的

精度评价标准得到的精度不能通过保线性考核的一阶精度.由此可判断该算法未能达到保线性模型下差分格式的一阶精度要求.

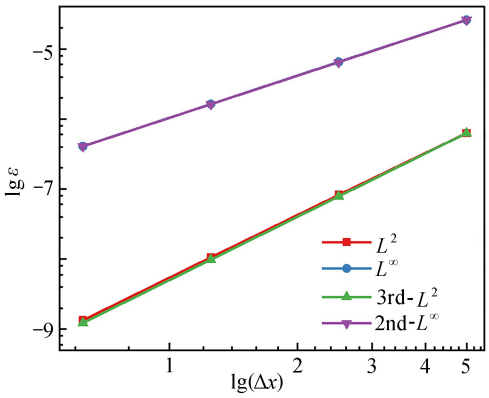

图 9 网格加密变化误差收敛阶

Fig. 9 Convergence orders of error variations due to the grid refinement

在 CAE 领域 FEM、FVM 和 FDM 构造理论不同,精度定义也有差异,基于保线性考核模型可以定性比较.目前广泛应用二阶精度的 FVM,用于求解保线性模型[14-18],控制体内假设线性分布,每个控制体边界处连续,在整个计算区域上任意点数值解没有误差.但是实际应用中发现很难达到误差机器精度零,除了有时候梯度重构过程引入误差外,如果存在非共面四边形积分面上,理论上就不具备保线性.如图 10 所示,在空间计算域为正方体计算保线性模型,对此结论通过算例进行说明.首先在均匀分布网格上,对程序进行机器精度零验证,然后对内部很小范围的网格施加随机扰动,形成非共面四边形,收敛解就会出现明显的误差.

作者不熟悉 FEM 算法,和专家讨论后初步认为:任意形状的单元需要进行坐标变换映射到规则单元,然后分布 Gauss 点,有些时候也用到边界单元,在三维空间单元的边界面映射函数仅有两个变量,因此,在非共面四边形积分面上同样存在 FVM 遇到的面心不唯一的问题.上述分析结论是否成立值得怀疑,欢迎有 FEM 应用经验的同行进行验证和批评指正.

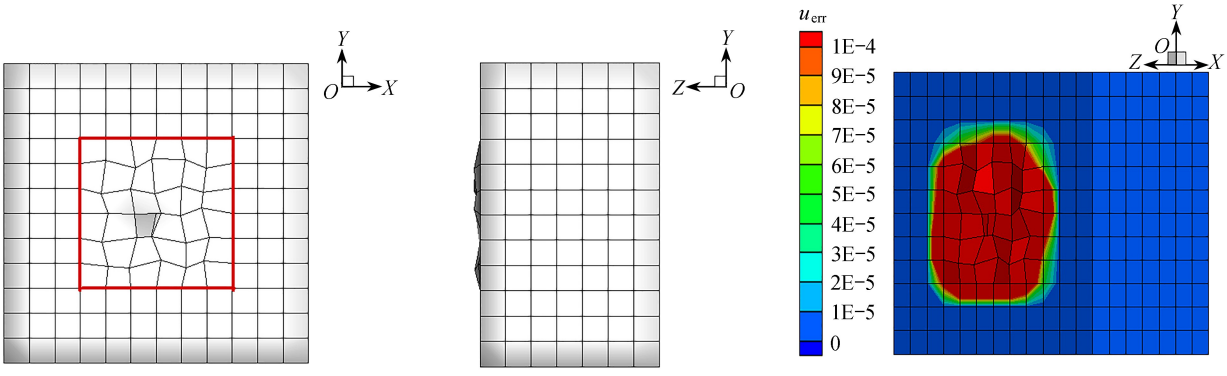

图 10 非共面四边形网格示意图和误差云图

Fig. 10 Schematic of the non-coplanar quadrilateral grid and the error cloud map

在研究 Euler 方程的几何诱导误差过程中,刘君等[19-20]提出了一种新颖的算法,即从包含源项的离散等价方程出发,采用与对流项相同格式对源项中的坐标变换导数进行离散化处理,从而有效消除曲线网格上计算均匀流时的几何诱导误差.文中将其简称为 DEER(discrete equivalence equation and its discrete rule)算法[21].DEER 算法具有广泛的适用性,能够适用于任何差分格式,且对坐标变换系数没有特殊要求,相较于 GCL 方法展现出更强的普适性,这为构建 UFDM 奠定了坚实的理论基础.原始 UFDM 采用一阶迎风格式求解 Euler 方程,最近采用 FVM 梯度重构思想,发展出二阶精度的 UFDM[22].本文进一步拓展了 UFDM 的应用范围,将其推广至热传导方程领域,旨在解决该方程的保线性问题,为提高数值模拟的精度和可靠性提供了

新的思路和方法.

引入梯度变量

$$(f,g)=\nabla u, \tag{25}$$

仅做一次坐标变换,计算空间上变量 (ξ,η) 表示的方程形式为

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\xi_x\frac{\partial f}{\partial \xi}+\eta_x\frac{\partial f}{\partial \eta}+\xi_y\frac{\partial g}{\partial \xi}+\eta_y\frac{\partial g}{\partial \eta}. \tag{26}$$

已知网格点上物理量,可以采用最小二乘等数值方法获得梯度.根据前面推导,在梯度为常数的情况下,采用中心格式离散以上方程,不会产生几何诱导误差,可以满足保线性要求.对图 7 的柱坐标网格,采用新方法的误差分布如图 11 所示.为验证机器精度零减少网格后,误差分布如图 12 所示,依然维持同样量级.为验证新算法对网格形状的适应性,如图 13 所示,沿 y 方向均匀、沿 x 方向按照正弦函数变化的网格形式,和图 14 所示在均匀网格基础上增加随机扰动的网格形式,计算线性分布问题,误差为机器精度零,表明新保线性算法在后续推广到非结构网格是可行的.

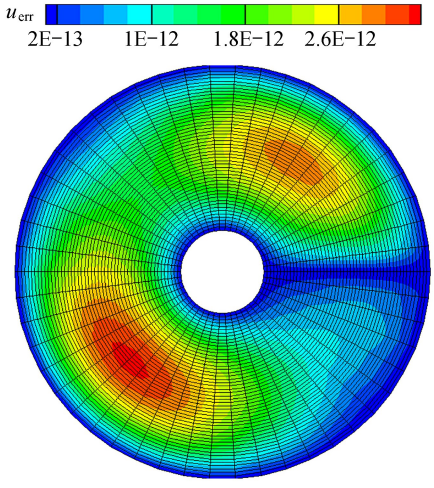

图 11　柱坐标消减误差(81×81)

Fig. 11　Error reductions in the cylindrical coordinates (81×81)

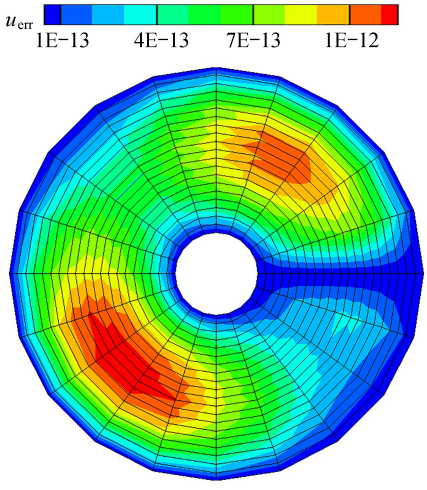

图 12　柱坐标消减误差(21×21)

Fig.12　Error reductions in the cylindrical coordinates (21×21)

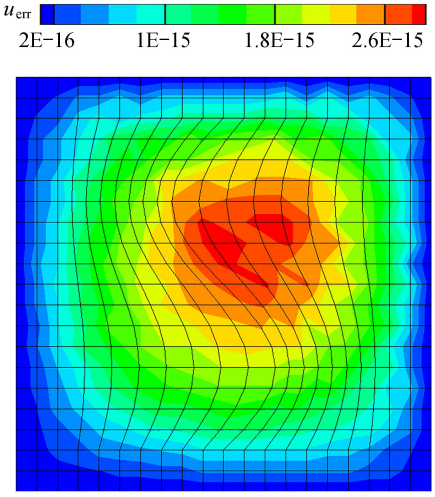

图 13　波浪网格误差

Fig. 13　Errors of the wavy grid

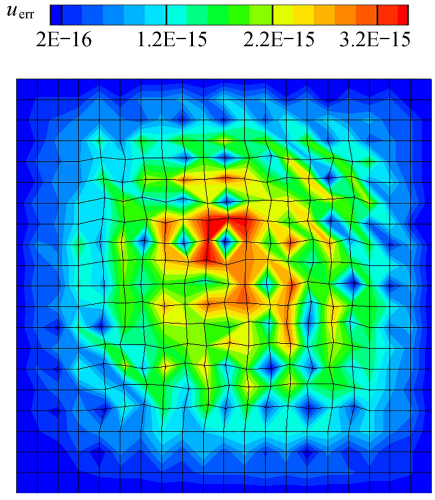

图 14　随机扰动网格误差

Fig. 14　Errors of the randomly disturbed grid

4 结 论

本文通过算例演示了差分格式计算热传导方程出现的几何诱导误差,理论建模分析证明了这种误差导致格式降阶.提出了保线性考核模型,通过算例和定性分析表明,在非均匀网格上差分格式达不到保线性考核模型的一阶精度.常用的 FVM 在非共面四边形积分面上不能保线性.进一步推广了 Euler 方程的二阶精度非结构网格有限差分法求解热传导方程,实现了在结构网格上的保线性算法.FDM 的几何建模和网格生成可以逐渐摆脱 CAD,本文提出的保线性算法的格式精度不比常用 FVM 和 FEM 差.后续可以研制全自动求解热传导方程的软件,未来有广阔应用前景.

参考文献(References):

[1] PESKIN C S. Flow patterns around heart valves: a numerical method[J]. *Journal of Computational Physics*, 1972, **10**(2): 252-271.

[2] ZHAO X, CHEN Z, YANG L, et al. Efficient boundary condition-enforced immersed boundary method for incompressible flows with moving boundaries[J]. *Journal of Computational Physics*, 2021, **441**: 110425.

[3] MITTAL R, SEO J H. Origin and evolution of immersed boundary methods in computational fluid dynamics [J]. *Physical Review Fluids*, 2023, **8**(10): 100501.

[4] 刘君, 陈洁, 韩芳. 基于离散等价方程的非结构网格有限差分法[J]. 航空学报, 2020, **41**(1): 123248. (LIU Jun, CHEN Jie, HAN Fang. Finite difference method for unstructured grid based on discrete equivalent equation[J]. *Acta Aeronautica et Astronautica Sinica*, 2020, **41**(1): 123248. (in Chinese))

[5] 刘君, 魏雁昕, 陈洁. 基于非结构网格有限差分法的扎染算法[J]. 航空学报, 2021, **42**(7): 124557. (LIU Jun, WEI Yanxin, CHEN Jie. Tie-dye algorithm based on finite difference method for unstructured grid[J]. *Acta Aeronautica et Astronautica Sinica*, 2021, **42**(7): 124557. (in Chinese))

[6] CHAWNER J R, DANNENHOFFER J, TAYLOR N J. Geometry, mesh generation, and the CFD 2030 vision [C]//*46th AIAA Fluid Dynamics Conference*. Washington DC, Reston, Virginia: AIAA, 2016: 3485.

[7] HINDMAN R G. Generalized coordinate forms of governing fluid equations and associated geometrically induced errors[J]. *AIAA Journal*, 1982, **20**(10): 1359-1367.

[8] STEGER J L. Implicit finite difference simulation of flow about arbitrary geometries with application to airfoils [C]//*10th Fluid and Plasmadynamics Conference*. Albuquerque NM, Reston, Virginia: AIAA, 1977: 665.

[9] THOMAS P D, LOMBARD C K. Geometric conservation law and its application to flow computations on moving grids[J]. *AIAA Journal*, 1979, **17**(10): 1030-1037.

[10] DENG X, MIN Y, MAO M, et al. Further studies on geometric conservation law and applications to high-order finite difference schemes with stationary grids[J]. *Journal of Computational Physics*, 2013, **239**: 90-111.

[11] NONOMURA T, TERAKADO D, ABE Y, et al. A new technique for freestream preservation of finite-difference WENO on curvilinear grid[J]. *Computers & Fluids*, 2015, **107**: 242-255.

[12] ZHU Y, SUN Z, REN Y, et al. A numerical strategy for freestream preservation of the high order weighted essentially non-oscillatory schemes on stationary curvilinear grids[J]. *Journal of Scientific Computing*, 2017, **72**(3): 1021-1048.

[13] 刘君, 魏雁昕, 韩芳. 有限差分法的坐标变换诱导误差[J]. 航空学报, 2021, **42**(6): 124397. (LIU Jun, WEI Yanxin, HAN Fang. Coordinate transformation induced errors of finite difference method[J]. *Acta Aeronautica et Astronautica Sinica*, 2021, **42**(6): 124397. (in Chinese))

[14] 刘君, 白晓征, 郭正. 非结构动网格计算方法: 及其在包含运动界面的流场模拟中的应用[M].长沙: 国防科技大学出版社, 2009.(LIU Jun, BAI Xiaozheng, GUO Zheng. *Unstructured moving grid computation methods*

and their applications in flow field simulations involving moving interfaces[M]. Changsha: National University of Defense Technology Press, 2009.(in Chinese))

[15] 陶文铨. 计算流体力学与传热学[M]. 北京: 中国建筑工业出版社, 1991. (TAO Wenquan. *Computational Fluid Dynamics and Heat Transfer*[M]. Beijing: China Architecture & Building Press, 1991. (in Chinese))

[16] 陶文铨. 计算传热学的近代进展[M]. 北京: 科学出版社, 2000. (TAO Wenquan. *Modern Progress of Computational Heat Transfer*[M]. Beijing: Science Press, 2000. (in Chinese))

[17] 张德良. 计算流体力学教程[M]. 北京: 高等教育出版社, 2010. (ZHANG Deliang. *Computational Fluid Mechanics Tutorial*[M]. Beijing: Higher Education Press, 2010. (in Chinese))

[18] 阎超. 计算流体力学方法及应用[M]. 北京: 北京航空航天大学出版社, 2006. (YAN Chao. *Computational Fluid Dynamics Method and Its Application*[M]. Beijing: Beijing University of Aeronautics & Astronautics Press, 2006. (in Chinese))

[19] 刘君, 韩芳, 夏冰. 有限差分法中几何守恒律的机理及算法[J]. 空气动力学学报, 2018, **36**(6): 917-926. (LIU Jun, HAN Fang, XIA Bing. Mechanism and algorithm for geometric conservation law in finite difference method[J]. *Acta Aerodynamica Sinica*, 2018, **36**(6): 917-926. (in Chinese))

[20] 刘君, 韩芳. 有限差分法中的贴体坐标变换[J]. 气体物理, 2018, **3**(5): 18-29. (LIU Jun, HAN Fang. Body-fitted coordinate transformation for finite difference method[J]. *Physics of Gases*, 2018, **3**(5): 18-29. (in Chinese))

[21] HAN F, XU C, LIU J. Improvement to a general methodology for free-stream preservation on curvilinear grids [J]. *Physics of Fluids*, 2022, **34**(11): 116111.

[22] GUAN T, CHEN J, LIU J, et al. A second-order-accuracy finite difference scheme for numerical computation on two-dimensional three-neighboring-node unstructured grids[J]. *Physics of Fluids*, 2024, **36**(3): 036109.