正交曲线坐标系基向量的二阶偏导数

陈 功1,朱文辉2

(1. 复旦大学 力学与工程科学系,上海 200443;2. 南通职业大学 基础课部,江苏 南通 226007)

摘要:研究了正交曲线坐标系基向量的二阶偏导数,运用基变换的单位正交性给出了当坐标函 数三阶偏导数连续时拉梅系数满足的两个偏微分方程,由此证明了基向量的二阶混合偏导数与 求导顺序无关,推导了基向量的二阶偏导数公式。

关键词:正交曲线坐标系;基向量;二阶偏导数;求导顺序;拉梅系数

中图分类号:0182.2 文献标识码:A 文章编号:1671-5322(2014)01-0022-04

正交曲线坐标系的引入,使物理学和工程技 术中许多问题的研究得以大幅简化[1-3]。不同于 直角坐标系,正交曲线坐标系的基是流动的,即为 坐标的向量值函数,因此基向量对坐标的求导公 式是正交曲线坐标系下计算的基础。一阶偏导数 公式可参看文献[4、5]等,在场论、张量等的计算 中经常会用到二阶偏导数^[6,7],但统一的计算公 式目前尚未见到。正交曲线坐标系基向量的偏导 数是三维向量,坐标系数由拉梅系数^[8]及其偏导 数组成。在二阶偏导数公式的推导过程中,按照 不同的求导顺序,二阶混合偏导数向量的对应系 数会产生不同的表达式。本文运用基变换的单位 正交性证明了当坐标函数三阶偏导数连续时拉梅 系数满足的两个偏微分方程,从而上述系数的不 同表达式实际上是相等的,因此基向量的二阶混 合偏导数与求导顺序无关,并按4种基本类型给 出了基向量的二阶偏导数公式。

设 *M* 为空间任意一点, (x_1, x_2, x_3) 是其直角 坐标, 位置向量 *OM* = \mathbf{r}_o (u_1, u_2, u_3) 称为点 *M* 的 曲线坐标, 函数 $u_i = u_i(x_1, x_2, x_3)$ 单值, 故存在反 函数 $x_i = x_i(u_1, u_2, u_3)$, 本文约定 $x_i = x_i(u_1, u_2, u_3)$ 的 三 阶 偏 导 数 连续 $(i = 1, 2, 3)_o$ $\mathbf{r}_i = (\frac{\partial x_1}{\partial u_i}, \frac{\partial x_2}{\partial u_i}, \frac{\partial x_3}{\partial u_i})^T \mathbf{e}_i = \frac{1}{H} \mathbf{r}_i$ 为曲线坐标下点 *M* 处两 两正交的单位基向量, 其中拉梅系数 $H_i = |\mathbf{r}_i| =$ $\sqrt{r_i^T r_i}$ (*i* = 1, 2, 3).

以下除特别说明,*i*,*j*,*k* 均表示 1、2、3 的一个 排列;用 $e_{i,i} < e_{i,j} < e_{i,k}$ 分别表示 e_i 对坐标 $u_i < u_j < u_k$ 的偏导数 $\frac{\partial e_i}{\partial u_i} < \frac{\partial e_i}{\partial u_j}$ 和 $\frac{\partial e_i}{\partial u_k}$; $e_{i,j} < e_{i,j} < e_{i,j} < e_{i,j} < e_{i,j} < e_{i,j}$ 和 $e_{i,k}$ 分别表示 e_i 的各个二阶偏导数 $\frac{\partial^2 e_i}{\partial u_i^2} < \frac{\partial^2 e_i}{\partial u_j^2}$, $\frac{\partial^2 e_i}{\partial u_i \partial u_j} < \frac{\partial^2 e_i}{\partial u_j \partial u_k}$ 和 $\frac{\partial^2 e_i}{\partial u_k \partial u_j}$ 。拉梅系数 H_i (*i* = 1,2,3) 的一阶、二阶偏导数同样表示,例如 $H_{i,j} = \frac{\partial H_i}{\partial u_j}, H_{i,jk} = \frac{\partial^2 H_i}{\partial u_k \partial u_j}$ 等。向量r对曲线坐标的 二、三阶偏导数用 $r_{ij} < r_{ik}$ 等表示。

1 引理

以下3个引理给出了空间任意一点处的位置 向量和单位基向量关于曲线坐标的偏导数与拉梅 系数的基本关系,用于证明本文的主要结论。

引理1

$$e_{i,i} = -H_j^{-1}H_{i,j}e_j - H_k^{-1}H_{i,k}e_k$$
(1)

$$\boldsymbol{e}_{i,j} = H_i^{-1} H_{j,i} \boldsymbol{e}_j \tag{2}$$

证明参见文献[8]。由于 *i*,*j*,*k* 互不相同,可 取1、2、3 的任何一个排列,所以(1)式和(2)式实 际上一共给出了9个公式。

引理2

收稿日期:2013-02-10

基金项目:复旦大学曦源项目(12190);江苏省高等教育教学改革研究课题重点项目(2011JSJC085) 作者简介:陈功(1989-),男,江苏南通人,主要研究方向为计算数学与流体计算力学。 通讯作者:朱文辉(1948-),男,上海市人,教授,主要研究方向为计算数学与数学建模。

其中*i*,*j*,*k* 互不相同,可取 1、2、3 的任何一个排列。

证明:由拉梅系数的定义和正交性知 $r_m^r r_n = H_m^2 \delta_{mn}$,当m = n = i,将 $r_i^r r_i = H_i^2$ 分别对坐标 u_i 和 u_j 求偏导数,即得(3)式。

当 $m = i, n = j, 将 r_i^T r_j = 0$ 对 u_j 求偏导数,得 $r_j^T r_{ij} + r_i^T r_{jj} = 0, \Re(3)$ 式中的 $r_j^T r_{ij} = H_i H_{i,j}$ 代人即有 $r_i^T r_{jj} = -H_j H_{j,i}$ 。再将 $r_i^T r_j = 0$ 对 u_j 求偏导数,得 $r_i^T r_{ik} + r_i^T r_{ik} = 0$

类似地,有 $r_i^T r_{ij} + r_k^T r_{ij} = 0$ 和 $r_k^T r_{ji} + r_j^T r_{ki} = 0$,将这 两式相减再与上式相加,注意到 $r_{ij} = r_{ji}$,得 $r_i^T r_{jk} = 0$ 。

引理 3 设 $i_{,j,k}$ 互不相同,为 $1_{,2,3}$ 的一个 排列,记矩阵 $(r_{i},r_{j},r_{k})^{T} = A_{(ijk)}$,对角阵 diag $(H_{i}, H_{j}, H_{k}) = H_{(ijk)}$,则 $B_{(ijk)} = H_{(ijk)}^{-1}A_{(ijk)}$ 为正交矩 阵,即 $B_{(ijk)}B_{(ijk)}^{T} = B_{(ijk)}^{T}B_{(ijk)} = E, E$ 是单位矩 阵。特别地, $B_{(123)} = H_{(123)}^{-1}A_{(123)} = (e_{1}, e_{2}, e_{3})^{T}$ 是直角坐标到曲线坐标的基变换阵。

引理3由线性代数知识^[9]和关系式 $r_m^r r_n = H_m^2 \delta_m$ 容易得到。

2 主要结论及其证明

按照不同的求导顺序计算二阶偏导数时,二 阶混合偏导数向量的对应系数会产生不同的表达 式,事实上,它们是相等的。下面的定理1给出了 拉梅系数满足的两个偏微分方程,这两个方程正 是证明这一结论的关键所在。由此,定理2证明 了基向量的二阶混合偏导数与求导顺序无关,并 按4种基本类型给出了基向量的二阶偏导数公 式。定理1和定理2是本文的主要结论。

定理1 设*i*,*j*,*k* 互不相同,可取1、2、3 的任 何一个排列,*H*,为正交曲线坐标系的拉梅系数, 则有

$$H_{i,jk} = (H_j^{-1}, H_k^{-1}) \binom{H_{i,j}H_{j,k}}{H_{i,k}H_{k,j}}$$
(5)

$$(H_{i}^{-1}, H_{j}^{-1}) \begin{pmatrix} H_{i,jj} \\ H_{j,ii} \end{pmatrix} = (H_{i}^{-2}, H_{j}^{-2}, H_{k}^{-2}) \begin{pmatrix} H_{i,i}H_{j,i} \\ H_{j,j}H_{i,j} \\ -H_{i,k}H_{j,k} \end{pmatrix}$$
(6)

证明:由(4)式有 $\mathbf{r}_{i}^{T}\mathbf{r}_{ik} = 0$,对 u_{i} 求偏导数得

由引理3, $B_{(jik)} = H_{(jik)}^{T}A_{(jik)}$ 为正交矩阵,故 有 $r_{ik}^{T}r_{ij} = r_{ik}^{T}B_{(jik)}^{T}B_{(jik)}r_{ij} = r_{ik}^{T}A_{(jik)}^{T}H_{(jik)}^{-2}A_{(jik)}r_{ij}$ 和 $r_{ii}^{T}r_{jk} = r_{ii}^{T}A_{(jik)}^{T}H(jik)^{-2}A_{(jik)}r_{jk}$ 。再运用引理2 的(3)和(4)两式可得

$$(r_{j}r_{ii}, r_{i}r_{ii}, r_{k}r_{ii}) = (-H_{i}H_{i,j}, H_{i}H_{i,i}, -H_{i}H_{i,k})$$
$$A_{(jik)}r_{jk} = (r_{j}, r_{i}, r_{k})^{T}r_{jk} = (r_{j}^{T}r_{jk}, r_{i}^{T}r_{jk}, r_{k}^{T}r_{jk})^{T} = (H_{j}H_{j,k}, 0, H_{k}H_{k,j})^{T}$$
于是

$$(-H_{i}H_{ij},H_{i}H_{i,i}, -H_{i}H_{i,k})H_{(jik)}^{-2}(H_{j}H_{j,k},0,H_{k}H_{kj})^{T} = -H_{j}^{-1}H_{i}H_{i,j}H_{j,k} - H_{k}^{-1}H_{i}H_{i,k}H_{k,j}$$

 $\boldsymbol{r}_{a}^{T}\boldsymbol{r}_{a} =$

将上述结果代人(7)式,整理得 $H_{i,k} = H_j^{-1}H_{i,j}$ $H_{j,k} + H_k^{-1}H_{i,k}H_{k,j}$,写成向量内积的形式即为(5) 式,式中的对称关系更加清晰。

下面证明公式(6)。

由公式(3)的 $\mathbf{r}_i^T \mathbf{r}_j = 0$,先对 u_i ,再对 u_j 求两次 偏导数,并由向量内积的交换性,得 $\mathbf{r}_j^T \mathbf{r}_{iij} + \mathbf{r}_{ii}^T \mathbf{r}_{jj} + \mathbf{r}_{ij}^T \mathbf{r}_{jj} = 0$ 。

由 $H_i H_{i,j} = r_i^T r_{ij}$ 和 $H_j H_{j,i} = r_j^T r_{ji}$, 分别对 u_j 和 u_i 求偏导数,得

$$\begin{aligned} H_{i,j}^{2} + H_{i}H_{i,jj} &= r_{ij}^{T}r_{ij} + r_{i}^{T}r_{ijj} \\ H_{j,i}^{2} + H_{j}H_{j,ii} &= r_{ji}^{T}r_{ji} + r_{j}^{T}r_{jii} \\ \text{ m式相加得 } H_{i,j}^{2} + H_{j,i}^{2} + H_{i}H_{i,jj} + H_{j}H_{j,ii} &= \\ r_{ij}^{T}r_{ij} + r_{ji}^{T}r_{ji} + r_{i}^{T}r_{ijj} + r_{j}^{T}r_{jii} &= \int \pm \pm \pm H_{i}H_{i,jj} + H_{j}H_{j,ii} \\ &= r_{i}^{T}r_{jij} \sqrt{r_{j}^{T}r_{jii}} = r_{j}^{T}r_{iij} \pi r_{ij}^{T}r_{ijj} = r_{ij}^{T}r_{ji}, \\ H_{i,j}^{2} + H_{j,i}^{2} + H_{i}H_{i,jj} + H_{j}H_{j,ii} &= r_{ji}^{T}r_{ji} - r_{ii}^{T}r_{jj} \\ &= r_{i}^{T}r_{ji} + H_{j,i}^{2} + H_{i}H_{i,jj} + H_{j}H_{j,ii} = r_{ji}^{T}r_{ji} - r_{ii}^{T}r_{jj} \\ &= r_{ij}^{T}r_{ji} = r_{ij}^{T}A_{(ijk)}^{T}H_{(ijk)}^{-2}A_{(ijk)}r_{ji} = H_{i,j}^{2} + H_{j,i}^{2} \\ &= -H_{i}^{-1}H_{j}H_{i,i}H_{j,i} - H_{j}^{-1}H_{i}H_{i,j}H_{j,j} + H_{k}^{-2}H_{i}H_{j}H_{i,k}H_{j,k} \\ &\in (\Lambda (8) \ total \ to$$

 $H_i^{-1}H_{i,j} + H_j^{-1}H_{j,ii} = H_i^{-2}H_{i,i}H_{j,i} + H_j^{-2}H_{j,j}H_{i,j} - H_k^{-2}H_{i,k}H_{j,k}$ 写成向量内积的形式即为(6)式。

(5)式和(6)式表示了拉梅系数二阶偏导数 满足的一种对称关系。特别地,(5)式说明第 *i* 个 拉梅系数对两个异于下标的变量的二阶混合偏导 数可以用一阶偏导数的算术运算直接得到。

定理2 曲线坐标系的基向量 *e_i*(*i*=1,2,3) 的二阶偏导数有4 种类型,计算公式分别为

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_{i,ii} &= A_{ii}\mathbf{e}_{i} + B_{ii}\mathbf{e}_{j} + C_{ii}\mathbf{e}_{k} \\ A_{ii} &= -(H_{j}^{-2}H_{i,j}^{2} + H_{k}^{-2}H_{i,k}^{2}) \\ \mathbf{e}_{ij} &= -(H_{j}^{-2}H_{i,j}^{2} + H_{k}^{-2}H_{i,k}^{2}) \end{aligned}$$
(9)

$$\begin{cases} B_{ii} = H_j^{-2} H_{j,i} H_{i,j} - H^{-1j} H_{i,ij} \\ C_{ii} = H_k^{-2} H_{k,i} H_{i,k} - H_k^{-1} H_{i,ik} \\ \begin{cases} e_{i,jj} = A_{jj} e_i + B_{jj} e_j + C_{jj} e_k \\ A_{jj} = -H_i^{-2} H_{j,i}^2 \\ B_{jj} = -H_i^{-2} H_{i,j} H_{j,i} + H^{-1i} H_{j,ji} \\ C_{jj} = -H_i^{-1} H_k^{-1} H_{j,i} H_{j,k} \\ \end{cases}$$
(10)
$$\begin{cases} e_{i,jk} = e_{i,kj} = A_{jk} e_i + B_{jk} e_j + C_{jk} e_k \\ A_{jk} = 0 \\ B_{jk} = H_i^{-1} H_k^{-1} H_{j,i} H_{k,i} \\ C_{jk} = H_i^{-1} H_j^{-1} H_{j,i} H_{k,j} \\ e_{i,ji} = e_{i,ij} = A_{ij} e_i + B_{ij} e_j + C_{ij} e_k \\ A_{ij} = -H_i^{-1} H_j^{-1} H_{i,j} H_{k,j} \\ e_{i,ji} = -H_i^{-1} H_j^{-1} H_{i,j} H_{j,i} \\ B_{ij} = -H_i^{-2} H_{i,i} H_{j,i} + H^{-1i} H_{j,ii} = (12) \\ H_j^{-2} H_{j,j} H_{i,j} - H_k^{-2} H_{i,k} H_{j,k} - H_j^{-1} H_{i,jj} \\ C = 0 \end{cases}$$

这里 $i_{,j}$ k 互不相同,均表示 1、2、3 的一个排列。 证明:将引理 1 中的(1)式 $e_{i,i} = -H_j^{-1}H_{i,j}e_j - H_k^{-1}H_{i,k}e_k$ 对 u_i 求偏导数并利用(2)式即得 e_i 的 二阶偏导数 $e_{i,ii} = \frac{\partial^2 e_i}{\partial u_i^2}$ 的计算公式,即(11)式得证。

将引理 1 中的(2)式 $e_{i,j} = H_i^{-1}H_{j,i}e_j$ 对 u_j 求 偏导数,再利用(1)式即得 e_i 的二阶偏导数 $e_{i,j} = \frac{\partial^2 e_i}{\partial u_i^2}$ 的计算公式,则(10)式得证。

下面推导 $e_{i,k}$ 和 $e_{i,k}$ 的计算公式,即(11)式, 同时证明 $e_{i,k} = e_{i,k}$ 。

将引理1(2)式 $e_{i,j} = H_i^{-1}H_{j,i}e_j$ 对 u_k 求偏导数,再利用(1)式得

$$\boldsymbol{e}_{i,jk} = (-H_i^{-2}H_{i,k}H_{j,i} + H_i^{-1}H_{j,ik})\boldsymbol{e}_j + H_i^{-1}H_j^{-1}H_{j,i}H_{k,j}\boldsymbol{e}_k$$

类似地可求得

$$e_{i,kj}$$
 -
 $H_i^{-1}H_k^{-1}H_{k,i}H_{j,k}e_j + (-H_i^{-2}H_{i,j}H_{k,i} + H_i^{-1}H_{k,ij})e_k$
比较上述两式可知, $e_{i,jk} = e_{i,jk}$ 当且仅当
 $-H_i^{-2}H_{i,k}H_{j,i} + H_i^{-1}H_{j,ik} = H_i^{-1}H_k^{-1}H_{k,i}H_{j,k}$ (13)
且

 $H_i^{-1}H_j^{-1}H_{j,i}H_{k,j} = -H_i^{-2}H_{i,j}H_{k,i}H_i^{-1}H_{k,ij}$ (14) 不难看出,(14)式可由(13)式中对换下标*j*、 *k* 直接得到,两式实际上为一个公式,故只需证明 (13)式即可。事实上,将定理1(5)式中下标*i,j*、 *k* 用*j*、*i*、*k* 替换,有 $H_{j,ik} = H_i^{-1}H_{j,i}H_{i,k}H_k^{-1}H_{j,k}H_{k,i}$, 将其代入 $e_{i,jk}$ 关于基向量 e_j 的系数,即得(13)式。 因此有 $e_{i,jk} = e_{i,jk}$,并且由(13)式得到公式(11)。

最后推导公式(12),即二阶偏导数 $e_{i,ji}$ 和 $e_{i,ji}$,并证明 $e_{i,ji} = e_{i,ji}$ 。

将引理1(2)式 $e_{i,j} = H_i^{-1}H_{j,i}e_j$ 对 u_i 求偏导数,再利用(2)式得

$$e_{i,ji} = H_i^{-1} H_{j,i}^{-1} H_{j,i} H_{i,j} e_i + (-H_i^{-2} H_{i,j} H_{j,i} + H_i^{-1} H_{j,ii}) e_j$$
(15)

类似地,由(1)式 $e_{i,i} = -H_j^{-1}H_{i,j}e_j - H_k^{-1}H_{i,k}e_k$ 对 u_i 求偏导数,再利用(1)和(2)式得

$$e_{i,ij} = H_i^{-1}H_j^{-1}H_{i,j}H_{j,i}e_i + (H_j^{-2}H_{j,j}H_{i,j} - H_j^{-1}H_{i,jj} - H^{-2}kH_{i,k}H_{j,k})e_j + (H^{-2}kH_{k,j}H_{i,k} - H_k^{-1}H_{i,kj} + H_j^{-1}H_k^{-1}H_{i,j}H_{j,k})e_k$$
(16)

由定理 1(5) 式有 $H_{i,kj} = (H_j^{-1}H_{i,j} + H_k^{-1}H_{i,k})$ $H_{j,k}$,将其代入(16) 式中 e_k 的系数,结果为 0,故 (16) 式即为

$$e_{i,ij} = H_i^{-1} H_j^{-1} H_{i,j} H_{j,i} e_i + (H_j^{-2} H_{j,j} H_{i,j} - H_j^{-1} H_{i,j} - H_k^{-2} H_{i,k} H_{j,k}) e_j (17)$$

比较(15)和(17)式可知, $e_{i,ji} = e_{i,ij}$ 当且仅当

-
$$H_i^{-}H_{i,i}H_{j,i} + H_i^{-}H_{j,ii} =$$

 $H_j^{-2}H_{j,j}H_{i,j} - H_j^{-1}H_{i,j} - H_k^{-2}H_{i,k}H_{j,k}$ (18)
事实上,(18)式由定理1(6)式移项可得,故
 $e_{i,ji} = e_{i,jj}$,且(12)式得证。

由于*i,j、k* 互不相同,可取1、2、3 的任何一个 排列,所以(9)和(11)分别给出了3个公式,公式 (10)和(12)分别给出了6个公式。

3 结语

包括著名的 Navier – Stokes 方程在内的大量 流体力学运动方程由于流体复杂的几何形态,需 要在与之相匹配的正交曲线坐标系中进行研究分 析和计算表达,而对各种变量的求偏导数比比皆 是,二阶及其以上的偏导数的计算繁琐、形式庞 大。本文给出的正交曲线坐标系中基向量的二阶 偏导数计算公式可以使计算大为简化,对理论研 究和工程应用都有一定的实用价值。运用本文中 式(9)~式(12),可以很快得出圆柱坐标系中基 向量的二阶偏导数均为0;类似地,对于如球坐标 系等更加复杂的正交曲线坐标系,其基向量的各 个二阶偏导数亦可方便地求出。

参考文献:

- Erturk E, Gökçöl C. Fourth order compact formulation of Navier Stokes equations and driven cavity flow at high Reynolds numbers [J]. Int. J. Numer. Meth. Fluids, 2006(4):421-436.
- [2] Kolesnikov A, Baker A J. Efficient implementation of high order methods for the advection diffusion equation [J]. Comput. Methods Appl. Mech. Engrg, 2000(2):701-722.
- [3] Tian Z F, Ge Y B. A fourth order compact finite difference scheme for the steady streamfunction vorticity formulation of the Navier - Stokes/Boussinesq equations[J]. Int. J. Numer. Meth. Fluids, 2003(5):495-518.
- [4] Matthews P C. Vector Calculus [M]. London: Springer Verlag, 1998.
- [5] Gupta M M, Kalita J C. A new paradigm for solving Navier Stokes equations: streamfunction velocity formulation [J]. J. Comput. Phys, 2005(1):52-68.
- [6] Radhakrishna Pillai A C. Fourth order exponential finite difference methods for boundary value problems of convective diffusion type[J]. Int. J. Numer. Meth. Fluids, 2001(1):87-106.
- [7] 周光炯,严宗毅,许世雄,等.流体力学(下册)[M].2 版. 北京:高等教育出版社,2000:364-377.
- [8] Zhang J. Preconditioned iterative methods and finite difference schemes for convection diffusion [J]. Appl. Math. Comput, 2000(1):1130.
- [9] 丘维声. 高等代数(上册)[M]. 北京:清华大学出版社,2010.

The Second Order Partial Deaivatives of Base Vectors in Orthogonal Cuavilinear Coordinate System

CHEN Gong¹, ZHU Wenhui²

(Department of Mechanics and Engineering Science Fudan University, Shanghai 200433, China)

Abstract: The second order partial derivatives of base vectors in orthogonal curvilinear coordinate system are studied in this paper. Two partial differential equations in which the Lame coefficients satisfied under the circumstances that the third order partial derivatives of the coordinate functions continuous are given by using the unit orthogonality of the change of base. Thus the assertion that the second order mixed partial derivatives are independence with the derivation order are demonstrated. The second order partial derivative formulas of base vectors are pushed out.

Keywords: orthogonal curvilinear coordinate system; base vector; second order partial derivative; order of derivation; Lame coefficient

(责任编辑:张英健)