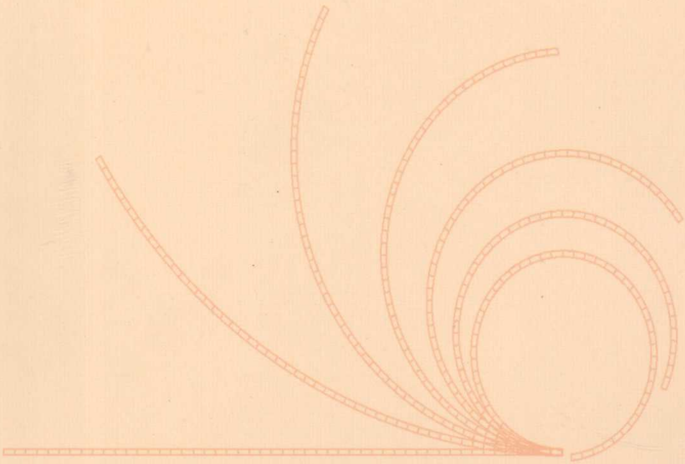
“十一五”国家重点图书 中国科学技术大学精品教材

计算力学基础

王秀喜 吴恒安 编著



中国科学技术大学出版社

中国科学技术大学精品教材

计算力学基础

JISUAN LIXUE JICHU

王秀喜　吴恒安　编著

中国科学技术大学出版社

内 容 简 介

本书以二维问题为例，用统一、综合的观点讨论求解复杂力学和工程技术问题各种计算机数值方法的基本概念、特点及其内在联系.

全书由四个部分组成.第一部分比较详细地讨论离散模型的求解方法、步骤和计算机程序实现；第二部分简要地讨论求解连续模型的各种传统近似方法，以及它们之间的相互关联和特点；第三部分讨论建立有限元法和边界元法列式的基本思想和步骤，讨论推导分片试函数的统一方法；第四部分讨论抛物线型、双曲线型和椭圆型偏微分方程的各种有限差分格式、特点和适用范围，分析它们的稳定性和精度等基本问题.本书的最后一章简要讨论分子动力学模拟的基本原理和方法.

本书适用于力学专业本科生教学，可作为机械、土木、航空航天、材料设计、环境工程和交通运输等理工科专业的研究生教材，也可作为相关专业高等学校教师和工程技术人员的参考书.

图书在版编目(CIP)数据

计算力学基础/王秀喜，吴恒安编著.—合肥：中国科学技术大学出版社，2009.1
(中国科学技术大学精品教材)
“十一五”国家重点图书
ISBN 978-7-312-02246-3

Ⅰ.计…　Ⅱ.①王…　②吴…　Ⅲ.计算力学—高等学校—教材　Ⅳ.O302

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2008)第 198619 号

中国科学技术大学出版社出版发行
安徽省合肥市金寨路 96 号，邮编：230026
网址　http://press.ustc.edu.cn
中国科学技术大学印刷厂
全国新华书店经销

开本：710×960 1/16　印张：20.625　插页：2　字数：390 千
2009 年 1 月第 1 版　2009 年 1 月第 1 次印刷
印数：1—3000 册
定价：33.00 元

总　　序

2008 年是中国科学技术大学建校五十周年. 为了反映五十年来办学理念和特色,集中展示教材建设的成果,学校决定组织编写出版代表中国科学技术大学教学水平的精品教材系列. 在各方的共同努力下,共组织选题 281 种,经过多轮、严格的评审,最后确定 50 种入选精品教材系列.

1958 年学校成立之时,教员大部分都来自中国科学院的各个研究所. 作为各个研究所的科研人员,他们到学校后保持了教学的同时又作研究的传统. 同时,根据"全院办校,所系结合"的原则,科学院各个研究所在科研第一线工作的杰出科学家也参与学校的教学,为本科生授课,将最新的科研成果融入到教学中. 五十年来,外界环境和内在条件都发生了很大变化,但学校以教学为主、教学与科研相结合的方针没有变. 正因为坚持了科学与技术相结合、理论与实践相结合、教学与科研相结合的方针,并形成了优良的传统,才培养出了一批又一批高质量的人才.

学校非常重视基础课和专业基础课教学的传统,也是她特别成功的原因之一. 当今社会,科技发展突飞猛进、科技成果日新月异,没有扎实的基础知识,很难在科学技术研究中作出重大贡献. 建校之初,华罗庚、吴有训、严济慈等老一辈科学家、教育家就身体力行,亲自为本科生讲授基础课. 他们以渊博的学识、精湛的讲课艺术、高尚的师德,带出一批又一批杰出的年轻教员,培养了一届又一届优秀学生. 这次入选校庆精品教材的绝大部分是本科生基础课或专业基础课的教材,其作者大多直接或间接受到过这些老一辈科学家、教育家的教诲和影响,因此在教材中也贯穿着这些先辈的教育教学理念与科学探索精神.

改革开放之初,学校最先选派青年骨干教师赴西方国家交流、学习,他

们在带回先进科学技术的同时，也把西方先进的教育理念、教学方法、教学内容等带回到中国科学技术大学，并以极大的热情进行教学实践，使“科学与技术相结合、理论与实践相结合、教学与科研相结合”的方针得到进一步深化，取得了非常好的效果，培养的学生得到全社会的认可.这些教学改革影响深远，直到今天仍然受到学生的欢迎，并辐射到其他高校.在入选的精品教材中，这种理念与尝试也都有充分的体现.

中国科学技术大学自建校以来就形成的又一传统是根据学生的特点，用创新的精神编写教材.五十年来，进入我校学习的都是基础扎实、学业优秀、求知欲强、勇于探索和追求的学生，针对他们的具体情况编写教材，才能更加有利于培养他们的创新精神.教师们坚持教学与科研的结合，根据自己的科研体会，借鉴目前国外相关专业有关课程的经验，注意理论与实际应用的结合，基础知识与最新发展的结合，课堂教学与课外实践的结合，精心组织材料、认真编写教材，使学生在掌握扎实的理论基础的同时，了解最新的研究方法，掌握实际应用的技术.

这次入选的50种精品教材，既是教学一线教师长期教学积累的成果，也是学校五十年教学传统的体现，反映了中国科学技术大学的教学理念、教学特色和教学改革成果.该系列精品教材的出版，既是向学校五十周年校庆的献礼，也是对那些在学校发展历史中留下宝贵财富的老一代科学家、教育家的最好纪念.

侯建国

2008年8月

前　言

科学家和工程师通常将他们所面临的自然现象或工程问题用数学模型来描述,正确、有效地求解这些数学模型是学术界和工程界长期以来的执着追求.解析方法和传统的近似方法都只能求解相对比较简单的问题,远远不能适应科学和工程技术发展的需要.

计算机技术和科学计算的兴起和迅猛发展是20世纪最重要的科技进步之一,科学计算的核心是计算方法,力学工作者对此做出了极其敏捷的响应.有限元法概念的提出和理论上的日臻成熟先是促使传统的结构分析发生了革命性的变化,然后成功地推广应用于其他领域.有限元法的发展也激励了传统差分法的觉醒,诱导了边界元法.这些方法和其他各种数值方法相互结合,协调发展,逐步形成了一个完整的计算力学体系.计算力学已经成为解决工程和应用科学问题的一种有效途径,它不仅可以用来解决复杂的工程技术问题,也能解释和发现一些自然现象.计算力学作为现代力学的一个重要分支,对应用科学和工程技术的发展起着巨大的推动作用.计算机数值模拟、理论分析和实验测试已经成为科学研究和工程应用实践的三个相互依存、不可或缺的手段.著名科学家钱学森在1994年展望21世纪力学的发展方向时曾经指出:“今日力学是一门用计算机去回答一切宏观的实际科学技术问题,计算方法非常重要;另一个辅助手段是巧妙设计的实验.”

计算力学以力学和应用数学为基础,以计算机为工具,用数值方法模拟工程和科学中的复杂问题.它不但能给出问题的数值结果,还可以通过图形形象地显示问题的发展、演化过程,便于更为深刻和细致地探讨和分析其内在的机理.在很多情况下,计算机数值模拟能够实现实验方法很难或者无法实施的工作.在做实验之前,可以先用计算力学方法对实验系统和过程进行数值模拟,为实验方案的设计提供更可靠的依据.另一方面,计算机模拟结果也需要实验测试数据的验证和支持.计算力学也推动了变分法和计算数学等领域的研究和发展.

计算力学方法和相应的大型通用计算机软件在工程和应用科学的各个领域都取得了巨大的成就,发挥了巨大的作用.为了适应科学和工程技术的需要,反映近

代数值方法的发展，国内外力学专业和相关理工科专业(如：机械、土木、航空航天、材料设计、环境工程以及交通运输等)都相继把计算力学列为重要的专业基础课，其教学内容、教学方法和教材也都在不断改进.这些课程和教材根据自己的专业特点、教育层次，针对不同的读者群，具有各自的特色.随着高等教育体系和结构的变化和发展，力学和理工科专业本科人才培养应该强调“通才教育”，拓宽基础，扩大知识面，加强力学学科内各专业及与其他学科的互相交叉、互相渗透，增强学生的适应能力.克服以往本科教育目标定得过窄、过专、过高的弊端.我们尝试编写一本符合上述原则的计算力学教材，以二维问题为例讨论计算力学中各种数值方法(加权余量法、变分原理、有限元法、有限差分法和边界元法等)的基本概念、基本特点以及各种方法之间的内在联系，用统一和综合的观点讨论各种方法.强调应用性，着重讨论各种方法的基本原理、特点及应用范围.强调讲清基本概念，不强求数学上的严密性.

工程实际问题和自然现象的数学模型大致分为两类，即离散模型和连续模型.

本教材的第一部分比较详细地讨论离散模型的求解方法、步骤和计算机程序实现.离散模型由有限多个元件在有限多个节点上连接而成，用有限多个节点参数表征问题的状态(或过程)，通常是一组代数方程组(或关于时间的常微分方程组).对于大型、复杂问题很难，或不可能一下子从整体上把握问题的特征，列出相应的方程组.一个很自然的想法是把组成整个系统的元件分开，由于元件一般都比较简单，很容易按照力学原理(平衡、连续和物理性质等方程)对单个元件进行分析，建立相应的方程；然后，再利用力学原理把所有的元件组装起来，得到系统的总体方程；最后，施加适当的边界条件(和初始条件)，求解方程组得到问题的解.上述过程特别适合在计算机上编程实现，并且具有通用性，为一类问题编写的程序很容易改写成求解其他类型问题的程序.在这一部分还形式逻辑地把连续问题化为离散模型(弹性力学平面问题和二维热传导问题的三节点三角形单元)，从而可以用求解离散问题的步骤分析连续问题，这就是有限元法的雏形.

本教材的第二部分简要地讨论求解连续模型的各种传统近似方法，以及它们之间的相互关联和特点.连续模型描述在一定空间(和时间)中的现象，归结为一个(组)偏微分方程、边界条件(和初始条件)，表征问题状态(或过程)的量是一个(组)具有一定连续性的函数.用数学推导的方法解析求解偏微分方程一般来说是非常困难的，寻找近似方法求解偏微分方程是力学和应用数学工作者长期以来重要的研究课题之一.传统近似方法的基本思想是把偏微分方程中的未知函数用一组选

定的试函数和待定参数的组合表示出来，采用不同的方法近似满足偏微分方程，从而得到一组关于待定参数的代数方程组，求解方程组计算出这些参数，就得到了问题的近似解.这类方法中选择的试函数遍及整个求解区域，可选的试函数不多，还要求满足一定的边界条件，求解复杂问题的能力仍然十分有限.另外，与试函数相对应的待定参数一般没有明确的物理意义.这类方法主要包括加权余量法，变分原理以及它们的各种派生形式.

本教材的第三部分讨论怎样把第一部分和第二部分的方法结合起来，建立一类系统的、具有可靠数学基础的、能够求解复杂连续问题的近似方法，主要包括有限元法和边界元法等.有限元法的基本思想是把整个求解区域划分为相互之间既不重叠也没有缝隙的单元之和.由于单元的形状通常都比较简单，比较规则，易于选取试函数，可用加权余量法、变分原理等近似方法建立单元的方程.得到单元的方程后，就可以用第一部分中讨论的离散问题的标准步骤近似求解连续问题.进行单元分析时，一般选择有明确物理意义的节点变量作为待定参数，由这些节点参数与具有一定性质的试函数的组合近似表示单元内的未知函数.因此，需要讨论推导试函数的统一方法.有限元法是对每一个单元分别设定近似未知函数，必须针对不同问题考虑这样分片选择的试函数在单元之间公共边界上的连续性要求.同时，还要讨论不同单元类型的精度和收敛性.有限元法是对求解的区域进行离散，在单元中分片选择试函数，试函数一般是多项式，形式简单，待定参数都有明确的物理意义，形成的总系数矩阵是带状(在很多情况下是对称)的.有限元法的通用性很强，国内外都研发了很多应用范围很广的商业软件.边界元法是对区域的边界进行离散，把要求解的问题的维数降低了一阶，使得最后形成的代数方程组的规模较小，减少了求解的计算量.但是，代数方程组的系数矩阵一般不是带状、对称的.寻找每一个问题相应的基本解，边界元公式(含有奇异性的基本解)的数值积分计算等都是比较困难的问题.边界元法的通用性不如有限元法，成熟的商业软件也较少.但是，边界元法对于带奇异性的、无限区域等特殊问题能提高计算精度和效率，具有明显的优势.针对具体问题的特点，适当地把有限元法和边界元法结合起来是一种有效的途径.

有限元法和边界元法都是在某种意义上近似满足偏微分方程，对区域或区域的边界进行离散求解.另一种方法是直接离散微分方程，即在区域的若干离散点上用差分运算近似表示未知函数的微分，这就是有限差分法的基本思想.有限差分法得到了以未知函数在差分点上的值为参数的代数方程组.待定参数有明确的物理

意义,方程组的系数矩阵是带状的.有限差分法处理复杂形状的边界条件比较困难.本教材的第四部分讨论了抛物线型、双曲线型和椭圆型偏微分方程的各种有限差分格式、特点和适应范围,分析了它们的稳定性和精度等基本问题.

从20世纪50年代末开始,纳米科学技术逐步发展成为一门崭新的前沿交叉性学科.计算机模拟是研究纳米力学的有效途径之一,可能实现用实验方法很难或无法完成的研究.分子动力学方法是一种有效的原子模拟方法,可以提供材料和器件等在变形过程中原子运动的细节,深入揭示纳米尺度材料和器件的复杂力学机制.本教材的最后一章简要讨论了分子动力学模拟的基本原理和方法.

倪向贵高级工程师和王宇副教授对本教材提出了许多宝贵建议.倪向贵高级工程师调试了第3章的程序.周焕林副教授为第10章计算了例题.王翰、吴士玉、申华等同学绘制了书中的图表.使用本教材的历届同学都提出过不少有益的意见.中国科学技术大学出版社给予了大力的支持和帮助.在此一并表示衷心的感谢.

本教材的内容适用于理科力学专业本科高年级专业基础课教学,同时也适用于理工科力学专业和其他相关专业的硕士学位研究生教学,对其他学科的科研人员和工程技术人员也有参考价值.

由于时间紧迫,编者水平有限,书中疏漏和不当之处在所难免,热忱欢迎读者批评指正.

编者

2008年3月

目　　次

第1章 绪 论

1.1 自然现象的数学模型

虽然科学家、应用数学家、工程师等考虑问题的观点、角度不同，但他们都是面对着自然现象或实际工程问题.在大多数情况下，他们都是用数学模型来定义、描述和分析一个自然现象或工程问题.

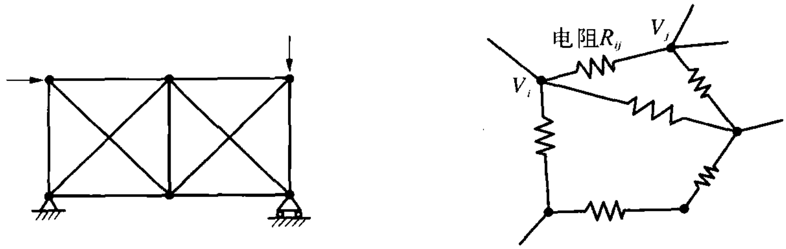
用物理量来描述一个自然现象或工程问题的状态，有些物理量的值是指定的、固定不变的，有些量是未知的、变化的.这些物理量叫做变量或参数.

完全描述一个问题的最小数目的一组变量，叫做独立变量.其他描述这个问题的变量依赖于这些独立变量，叫做因变量.在很多情况下，还会有些约束条件，它们是指定的，或从物理意义上施加的条件.

对一个问题，如果不考虑时间这一变量，其他的物理量统称为广义坐标.独立的广义坐标的最大数就是这一问题的自由度数.自由度就是在不违背约束条件情况下，能任意独立变化的广义坐标.

自然现象或工程问题是如此的复杂，以至我们很难甚至不可能一下子就能从整体上把握、分析一个问题，一种很自然的方法是把整个系统划分成若干单独的元件(单元、元素).这些元件比较简单，对其进行分析较为容易，然后再把这些元件进行组合，恢复成(或近似恢复成)原来的系统.

很多情况下，用有限多个元件组合起来，就能得到一个问题的分析模型.这种问题叫做离散问题.如图1.1所示的平面桁架结构和电路问题.这是由有限个杆件(电阻)在若干个节点上连接起来的问题.各节点的位移(电压)就是该问题的独立的广义坐标(自由度)，它们是有限多个离散的参数.求得各节点的位移(电压)后，就能进一步求出杆件(电阻)中的内力(电流)等.离散问题的数学模型通常都是代数方程组(或者是关于时间的常微分方程组).



(a) 平面桁架　　　　(b) 电路

图 1.1　离散问题模型

自然现象或实际工程中另一类问题是在一个区域中发生的,研究这类问题的方法通常是对整个区域进行无限细分,取出其中任一无限小的微元进行分析,最后得到的是微分方程组.在这个过程中隐含着把整个求解区域分成无限多个单元,这类问题叫做连续问题.描述连续问题的变量的是一组场变量,是一组具有一定连续性的函数,不再是有限多个离散的参数,它们可能取无限多个值,具有无限多个自由度.如图 1.2 所示的二维热传导问题.

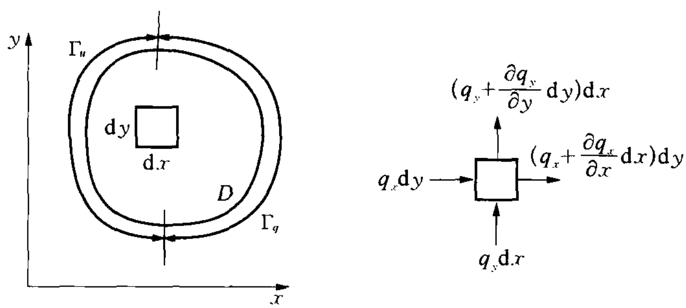


图 1.2　二维热传导问题

由图 1.2 所示的微元分析可以得到如下微分方程和边界条件

$$\left\{\begin{aligned} &\frac{\partial q_x}{\partial x}+\frac{\partial q_y}{\partial y}-Q=0 \\ &q_x=-k\frac{\partial u}{\partial x} \\ &q_y=-k\frac{\partial u}{\partial y}\end{aligned}\right. \qquad \text{在区域 } D \text{ 内} \tag{1.1a}$$

$$\left.\begin{aligned} u &= \overline{u} && \text{在边界 } \Gamma_u \text{ 上} \\ q_n &= \overline{q} && \text{在边界 } \Gamma_q \text{ 上} \end{aligned}\right\} \tag{1.1b}$$

将(1.1a)的第2式和第3式代入第1式，以上方程可写成

$$\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(k\,\frac{\partial u}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)\right)+Q=0 \qquad \text{在区域 } D \text{ 内} \tag{1.2a}$$

$$\left.\begin{aligned} u &= \overline{u} && \text{在边界 } \Gamma_u \text{ 上} \\ q_n &= \overline{q} && \text{在边界 } \Gamma_q \text{ 上} \end{aligned}\right\} \tag{1.2b}$$

在这个问题中温度场 $u(x, y)$是描述热传导的基本变量，它是坐标(x, y)的连续函数. 在这里(x, y)是连续变量，独立的广义坐标，它们可能取无限多个值.

用解析方法求连续问题(微分方程)的精确解，只能解为数不多的简单问题，远远不能满足科学研究和工程实际的需要. 因此，连续问题常常被近似地化为离散问题，把微分方程(组)化为代数方程组，求得连续问题的近似解. 当然，一个最基本的要求是随着离散变量数目的不断增加，离散系统的解越来越趋于原来连续问题的解析解.

1.2 问题的提法和分类

根据现象的物理特点，离散问题和连续问题分别可以分为三类，它们是：

(1) 平衡问题. 描述这类问题的变量不随时间变化，保持常量，通常也称为稳态问题. 如结构静力学问题、稳态可压缩流动问题、静电场问题、网络中静态电压分布问题等；

(2) 特征值问题. 这类问题可以理解为平衡问题的扩展，其中除要求解一个相应的稳态状态外，还要确定一类参数的临界值. 如结构的屈曲和稳定问题、机械系统的固有频率问题、电路中的谐振问题等；

(3) 传播问题. 系统的状态随时间变化，并与已知的初始状态有关. 如弹性介质中的应力波问题、振动问题、非稳态的热传导问题等.

描述一个问题，不管是离散问题还是连续问题，通常需要场方程和边界条件，其最一般的形式可以写成

$$f_D(u_1, u_2, \cdots, u_m; x_1, x_2, \cdots, x_n) = 0 \qquad 在区域 D 内 \qquad (1.3)$$

$$f_\Gamma(u_1, u_2, \cdots, u_m; x_1, x_2, \cdots, x_n) = 0 \qquad 在边界 \Gamma 上 \qquad (1.4)$$

其中 $u_1, u_2, \cdots, u_m$ 是因变量，$x_1, x_2, \cdots, x_n$ 是独立变量，D 是求解区域，Γ 是求解区域的边界，f_D、f_Γ 是作用在变量上的算子，如代数算子、微分算子等.

方程(1.3)和(1.4)称为描述一个问题的控制方程，不同类型的问题具有不同的控制方程，归纳列在表 1.1 中.

表 1.1　各种问题及对应的控制方程

问题分类	控制方程	
	离散问题	连续问题
平衡问题	代数方程组	常微分方程或偏微分方程(组)，边界条件
特征值问题	代数方程组，或常微分方程组	常微分方程或偏微分方程(组)，边界条件
传播问题	常微分方程组，初始条件，边界条件	偏微分方程(组)，初始条件，边界条件

对于传播问题，初始条件可以理解为在时刻 $t = 0$ 时的场方程.

对于一个问题，如果方程(1.3)和(1.4)的因变量不但有解，而且解是唯一的，解的显式表达式可写为

$$u_i = u_i(x_1, x_2, \cdots, x_n) \quad i = 1, 2, \cdots, m \qquad (1.5)$$

一般来说，如果场方程的个数多于因变量的个数，则方程无解，并称这组方程是不相容的；如果场方程的个数少于因变量的个数，则方程的解不唯一，不能得到如(1.5)式所示的显式表达式的解；如果场方程的个数等于因变量的个数，这是一个完整的方程组，方程的解仍可能存在如下几种情况：

a) 解不存在；

b) 存在唯一解；

c) 解不唯一(存在多于一个解).

很明显，对于一个物理问题，只能有一个解，造成描述它的数学模型(方程)出现解不存在或者解不唯一的原因可能是描述这一现象的物理模型不够精确，在数值计算中误差(舍入误差，截断误差)积累，某些应该满足的物理准则，在数学模型

或求解过程中没有体现出来，等等.如图1.3所示，一条连续的导数$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}$曲线可能对应若干条不同的不连续曲线和一条唯一的连续曲线$u(x)$.如果一个问题的场方程是用$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}$表示的，并且它本身是连续的.求解这个方程可能得到不唯一的解$u(x)$.只有施加一个附加条件(方程)，即$u(x)$也是连续的，才能得到唯一解.这类附加的条件，在力学中通常称为连续性、协调性或可积性.

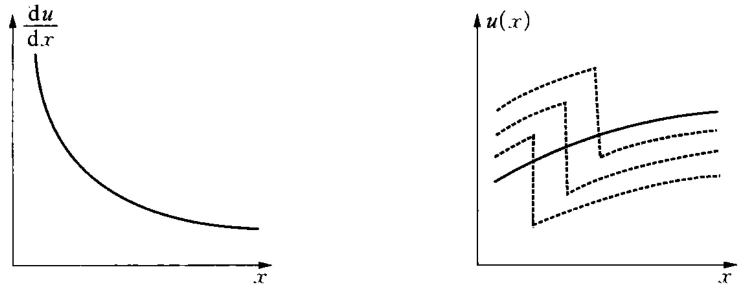


图1.3 同一导数对应不同曲线

存在显式解所需要的边界条件的个数与因变量的个数和场微分方程的性质有关.一组充分的边界条件称为是完整的.应该注意，一个边界条件方程，沿区域不同边界部分可能表示不同的边界条件.例如，边界条件

$$a\frac{\partial u}{\partial n}+bu=c$$

在边界的不同部分，a，b，c可能取不同的值(包括0)，还要指出，在只有一个因变量的条件下，如果场方程的微分阶量高于1，则需要多于一个边界条件.

通常连续问题的场方程和边界条件可写成如下形式

$$a_1\mathrm{L}_1u_1+a_2\mathrm{L}_2u_2+\cdots+a_m\mathrm{L}_mu_m=p \qquad \text{在区域} D \text{内} \tag{1.6}$$

$$b_1\mathrm{M}_1u_1+b_2\mathrm{M}_2u_2+\cdots+b_m\mathrm{M}_mu_m=\gamma \qquad \text{在边界} \Gamma \text{上} \tag{1.7}$$

其中a_1，a_2，$\cdots$，a_m；b_1，b_2，$\cdots$，b_m；p，γ是因变量u_i和独立变量x_j的函数；L_1，L_2，$\cdots$，L_m；M_1，M_2，$\cdots$，M_m是微分算子，算子是对独立变量x_j进行微分，上式可写成如下矩阵形式

$$(\mathrm{L})\boldsymbol{u}=p \qquad \text{在区域} D \text{内} \tag{1.8}$$