

王计敏、编著

热工计算 理论与实务

Regong Jisuan
Lilun Yu Shiwu

中国科学技术大学出版社

热工计算 理论与实务

王计敏 / 编著



中国科学技术大学出版社

内 容 简 介

本书共分7章,第1、第2章主要介绍热工计算问题中涉及的典型数值计算理论;第3章为以热工基础为重点的计算案例,第4章则联系工程应用案例进行计算机分析与设计;第5章通过使用高炉热风炉节能模拟系统开发实例展现软件设计、分析与开发过程;第6、第7章介绍 Microsoft Visual Basic 语言,以及程序结构化分析与设计等内容。

本书既可作为能源与动力类的本科计算机实践类教材,也可以作为在读研究生和青年教师的科研重要参考书。

图书在版编目(CIP)数据

热工计算理论与实务/王计敏编著. —合肥:中国科学技术大学出版社,2018. 5
ISBN 978-7-312-04427-4

I. 热… II. 王… III. 热工学—计算 IV. TK122

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2018)第 053159 号

出版 中国科学技术大学出版社
安徽省合肥市金寨路 96 号,230026
<http://press.ustc.edu.cn>
<https://zgkxjsdxcbs.tmall.com>
印刷 安徽省瑞隆印务有限公司
发行 中国科学技术大学出版社
经销 全国新华书店
开本 710 mm×1000 mm 1/16
印张 18.5
字数 383 千
版次 2018 年 5 月第 1 版
印次 2018 年 5 月第 1 次印刷
定价 45.00 元

前 言

众所周知,常见的热工计算问题不仅繁难,而且有些是根本无法解决的。随着计算机的推广和普及以及计算方法的发展,计算机技术在热工问题的分析与研究中发挥着重要作用。为完善能源与动力专业本科教学体系,适应卓越工程师计划培养要求,提高学生运用计算机技术解决各种复杂实际工程问题的能力,根据多年教学实践,并参考国内外类似教材,以可视化程序设计语言——Microsoft Visual Basic 为手段,结合传热学、工程流体力学、工程热力学、燃料及燃烧、耐火与隔热材料、换热器原理与设计、火焰炉与锅炉原理、系统节能等相关知识,分别以传热学算例(炉衬热损失、墙角导热、矩形空腔导热、肋片导热、无限大平板导热、铜管导热、平板传热、墙体导热、混凝土梁柱导热)、工程热力学算例(容器中气体质量、朗肯循环效率、再热循环效率、回热循环)、工程流体力学算例(并联管路、串联管路、虹吸管流量、环状管网、圆柱绕流、平行平板间流动)、燃料与燃烧算例(固/液体燃料理论燃烧温度计算)为基础算例,并结合专业综合与工程案例,即轧钢能耗优化、炉衬热损失与费用、管道阻力损失、铜底吹炉烟效率、蓄热式熔铝炉热平衡、管状换热器设计、板式换热器设计、推钢式加热炉钢坯温度、余热锅炉热力、重力式蒸发管传热计算,综合运用热工学知识进行计算机编程实践。针对大学生创新创业训练计划,以高炉热风炉节能模拟系统为软件开发实例展现软件分析与设计过程,使学生掌握一定的数值计算方法与计算机技术,灵活运用所学知识解决热工计算问题,从而为毕业后走上工作岗位,更好地解决复杂的实际工程问题奠定坚实的基础。

全书共分7章,其中第1、第2章主要介绍热工计算问题中涉及的典型数值计算理论,第3章以热工基础为重点计算案例,第4章则联系工

程应用案例进行计算机分析与设计,第5章通过使用高炉热风炉节能模拟系统开发实例展现软件设计、分析与开发过程,第6、第7章介绍相关课程教学范例和 Microsoft Visual Basic 语言,以及程序结构化分析与设计等内容。第6、第7章的设置是为了适应本科生教学需要和满足课程体系的完整性。本书从热工数值计算理论、热工基础算例和工程应用案例分析、热工软件开发等层次全面展开热工问题的计算机分析与设计,可作为能源与动力类的本科计算机实践类教材,也可作为研究生热工数值计算课程的教学参考书,或能源与动力类教师、科研与设计人员的工具书。

本书从调研、构思、查阅、编写、编程实现到正式出版,历时数年,已在校内试用多年,多次修改补充完善,在顾明言教授等前辈的热情指导和严大炜等同事的支持下,最终完成付梓出版,希望本书能促使能源与动力专业的本科生计算机实践教学目标的实现,提高运用计算机解决实际工程问题能力。本书由王计敏编写,李文科副教授审阅,但是由于本人水平有限,且热工学原理与工程应用繁难,书中缺点和错误在所难免,望同行与读者及时给予批评、指正。

感谢国家重点研发计划资助(No. 2017YFB0601805)和安徽省自然科学基金(No. 1708085ME108)的支持!并感谢校级教学研究项目“面向卓越工程师背景下热工计算机实践课程教学改革研究”的支持!

作 者

2017 年 12 月于佳山

目 录

前言	(i)
第 1 章 偏微分方程的差分数值解法	(1)
1.1 流动与传热控制方程	(1)
1.2 离散方程的建立	(3)
1.3 离散方程的求解方法	(4)
1.3.1 划分网格	(4)
1.3.2 构造差分方程	(4)
1.3.3 解差分方程	(6)
第 2 章 常见数值计算方法	(7)
2.1 常微分方程数值解法	(7)
2.2 非线性代数方程的解法	(10)
2.2.1 迭代法	(10)
2.2.2 牛顿迭代法	(10)
2.2.3 二分法	(11)
2.3 函数最优化解法	(12)
2.4 线性代数方程组解法	(15)
2.5 插值与拟合	(16)
2.5.1 线性插值	(16)
2.5.2 线性拟合	(17)
第 3 章 热工基础算例	(19)
3.1 传热学算例	(19)
3.1.1 炉衬热损失计算	(19)
3.1.2 墙角导热计算	(23)
3.1.3 矩形空腔导热计算	(26)
3.1.4 肋片导热计算	(29)

3.1.5 无限大平板导热计算	(33)
3.1.6 铜管导热计算	(38)
3.1.7 平板传热计算	(44)
3.1.8 墙体导热计算	(47)
3.1.9 混凝土梁柱导热计算	(52)
3.2 工程热力学算例	(57)
3.2.1 容器中气体质量计算	(57)
3.2.2 朗肯循环效率计算	(60)
3.2.3 再热循环效率计算	(63)
3.2.4 回热循环效率计算	(67)
3.3 工程流体力学算例	(71)
3.3.1 并联管路损失计算	(71)
3.3.2 串联管路损失计算	(75)
3.3.3 虹吸管流量计算	(77)
3.3.4 环状管网水力计算	(81)
3.3.5 圆柱绕流计算	(85)
3.3.6 平行平板间流动计算	(89)
3.4 燃料与燃烧算例	(92)
第4章 热工综合与工程案例	(97)
4.1 轧钢能耗优化计算	(97)
4.1.1 问题提出	(97)
4.1.2 计算分析	(98)
4.1.3 程序设计	(99)
4.2 炉衬热损失与费用计算	(101)
4.2.1 计算原理与分析	(101)
4.2.2 程序设计	(103)
4.3 管道阻力损失计算	(105)
4.3.1 计算原理与分析	(105)
4.3.2 程序设计	(108)
4.4 铜底吹炉烟效率计算	(110)
4.4.1 计算原理与分析	(110)
4.4.2 程序设计	(115)
4.5 蓄热式熔铝炉热平衡计算	(118)
4.5.1 计算原理与分析	(118)

4.5.2 程序设计	(121)
4.6 管状换热器设计计算	(128)
4.6.1 计算原理与分析	(128)
4.6.2 程序设计	(134)
4.7 板式换热器设计计算	(136)
4.7.1 计算原理与分析	(136)
4.7.2 程序设计	(138)
4.8 推钢式加热炉钢坯温度计算	(139)
4.8.1 计算原理与分析	(139)
4.8.2 程序设计	(147)
4.9 水泥窑余热锅炉热力计算	(150)
4.9.1 计算原理与分析	(150)
4.9.2 程序设计	(161)
4.10 重力式蔡热管传热计算	(182)
4.10.1 计算原理与分析	(182)
4.10.2 程序设计	(191)
第 5 章 热工软件开发实例	(197)
5.1 高炉热风炉热工理论	(197)
5.1.1 热平衡计算	(197)
5.1.2 蓄热室传热模拟	(202)
5.1.3 燃烧与操作优化	(207)
5.2 高炉热风炉节能模拟系统开发	(209)
5.2.1 系统功能需求	(209)
5.2.2 数据流图分析	(210)
5.2.3 程序实现	(213)
5.2.4 界面设计	(217)
第 6 章 热工计算机实践课程教学范例	(227)
6.1 热工计算机实践课程教学要求	(227)
6.2 热工计算机实践报告示例	(228)
6.3 热工计算机实践课堂报告安排	(248)
6.4 热工计算机实践任务书	(249)
6.5 热工计算机实践考核方式	(252)
6.6 热工计算机实践补充说明	(253)

6.6.1 外部控件	(253)
6.6.2 Access 数据库访问方式	(256)
6.6.3 数据支持文件	(259)
6.6.4 补充说明	(261)
第 7 章 Visual Basic 语言简介及软件设计	(262)
7.1 Visual Basic 语言简介	(262)
7.1.1 Visual Basic 程序的界面设计	(262)
7.1.2 Visual Basic 语言基础	(266)
7.2 程序结构化分析与设计	(276)
7.2.1 需求分析	(276)
7.2.2 结构化分析	(277)
7.2.3 系统设计	(281)
参考文献	(285)

第 1 章 偏微分方程的差分数值解法

1.1 流动与传热控制方程

常见的流动传热问题,都是由连续性方程、Navier-Stokes(动量)方程和能量方程规定的,限于教材特点和方便理解,重点介绍二维不可压缩流体的常物性的控制方程。

连续性方程

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (1.1)$$

动量方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial \tau} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \\ \frac{\partial v}{\partial \tau} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \end{aligned} \quad (1.2)$$

能量方程

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = a \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + S \quad (1.3)$$

利用连续性方程,把对流项加以改写,得

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} + \frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial uv}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (1.4)$$

$$\frac{\partial v}{\partial \tau} + \frac{\partial uv}{\partial x} + \frac{\partial v^2}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \quad (1.5)$$

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} + \frac{\partial uT}{\partial x} + \frac{\partial vT}{\partial y} = a \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + S \quad (1.6)$$

式中, u, v 为 x, y 方向的速度分量; p 为压力; ρ, μ, a 分别为流体的密度、运动黏度及热扩散率; T, τ 分别为温度及时间; S 为能量方程源项。

具有一个自变量的微分方程称为常微分方程,而具有两个或两个以上自变量

的微分方程为偏微分方程。从数学角度来说,把常见流动传热问题的二阶线性偏微分方程写成一般形式,即

$$A(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + B(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = F\left(x, y, u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}\right) \quad (1.7)$$

根据系数 A, B, C 之间的关系可将偏微分方程分为以下 3 种类型:

$$\begin{cases} B^2 - 4AC < 0, & \text{椭圆型} \\ B^2 - 4AC = 0, & \text{抛物型} \\ B^2 - 4AC > 0, & \text{双曲型} \end{cases}$$

椭圆型、抛物型和双曲型偏微分方程的典型例子分别是拉普拉斯方程、一维扩散方程和一维波动方程,即

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \quad (1.8)$$

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (1.9)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial \tau^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (1.10)$$

抛物型微分方程的特点是方程中含有因变量对时间的一阶导数,它们描写了物理上的非稳态问题。对于这一类物理问题,上一时刻的情况或条件会影响到下一时刻的结果而不会反过来。在数值求解时,不必将时间坐标上求解范围内各个计算时刻上的离散方程联立起来求解,而是从已知的(或已求解出的)某一时层上的值出发,根据边界条件,将解一步一步地向前推进。抛物型方程的这一特点可以大大节省所需的计算机内存与计算时间。椭圆型微分方程描写了稳态的物理问题。对这类问题,求解区域内各点之值是互相影响的。此时因区域内各节点离散需联立求解,而不能先把其中一个小区域中的值解出来再去求其他部分之值。由以上叙述可见,不同类型的方程所描写的问题的值的求解方法是不一样的。在进行流动与传热问题的计算之前应先查明所研究问题控制方程的类型。

每个方程都是由非稳态项、对流项、扩散项与源项(Navier-Stokes 方程中的压力梯度暂且作为源项看待)四项组成的。于是,在研究建立离散方程的方法时,为避免复杂化,可不必着眼于完全的方程,而是把同一类型的项都取出一个来研究,这就导致一维非稳态的对流-扩散方程,即

$$\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial \tau} + \frac{\partial(\rho u\varphi)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + S \quad (1.11)$$

式中, φ 为广义变量,可以代表速度、温度、浓度等; Γ 为相应于 φ 的广义扩散系数; S 为广义源项,代表了一切不能归入到其他项中的量未必是物理上的真正源项。为方便起见,假设 ρ, Γ 为常数。

1.2 离散方程的建立

在一定的初始条件、边界条件下,在定解域中求解偏微分方程,一般是很难实现的。只有在极其简单的规则域中得到解析解,而这些解析解远不能满足工程上的要求。若采用差分法求解偏微分方程,则可以得到较为满意的数值解。一般来说,将偏微分方程的作用域划分为等间距网格,用偏差商代替偏导数,差分方程代替微分方程,某一节点的函数值用相邻节点的函数值表示,这样将得到关于内部节点函数值的一个线性代数方程组,解此方程组就可以得到关于内部节点的数值解,这种解法就称为偏微分方程的差分数值解法,这里重点介绍建立有限差分离散方程的泰勒(Taylor)展开法。

设函数 $f(x)$ 是 $n+1$ 阶连续可微的,则在坐标 $x=a$ 附近展开成泰勒级数为

$$\begin{aligned} f(x) = & f(a) + (x-a)f^{(1)}(a) + \frac{(x-a)^2}{2!}f^{(2)}(a) + \cdots \\ & + \frac{(x-a)^n}{n!}f^{(n)}(a) + \frac{(x-a)^{n+1}}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\xi) \end{aligned} \quad (1.12)$$

若级数取至 n 阶,则最后项为舍入误差。当 $x=x_0+h$ 时,

$$f(x) = f(x_0) + hf^{(1)}(x_0) + \frac{h^2}{2!}f^{(2)}(x_0) + \cdots \quad (1.13)$$

若用前三项逼近一阶导数,忽略二阶项,则得一阶导数的向前差分,即

$$f^{(1)}(x_0) = \frac{f(x) - f(x_0)}{h} - \frac{h}{2}f^{(2)}(x_0) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} + O(h) \quad (1.14)$$

当 $x=x_0-h$ 时,

$$f(x) = f(x_0) - hf^{(1)}(x_0) + \frac{h^2}{2!}f^{(2)}(x_0) - \cdots \quad (1.15)$$

同样可以得到一阶导热向后差分格式为

$$f^{(1)}(x_0) = \frac{f(x_0) - f(x_0-h)}{h} + O(h) \quad (1.16)$$

泰勒级数相减,可得一阶导数的中心差分格式为

$$f^{(1)}(x_0) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h} + O(h^2) \quad (1.17)$$

泰勒级数相加,可得二阶导数的中心差分格式为

$$f^{(2)}(x_0) = \frac{f(x_0+h) - 2f(x_0) + f(x_0-h)}{h^2} + O(h^2) \quad (1.18)$$

1.3 离散方程的求解方法

1.3.1 划分网格

对二维来说,将整个求解区域分成边长为 h 的正方形网格,如图 1.1 所示。将 x 坐标编号为 $\cdots, i-1, i, i+1, \cdots$,将 y 坐标编号为 $\cdots, j-1, j, j+1, \cdots$,并且用坐标编号 (i, j) 代替坐标 (x, y) 。

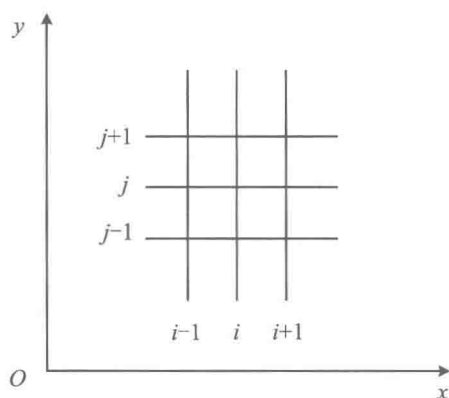


图 1.1 网格划分

1.3.2 构造差分方程

对二维椭圆型偏微分方程,即

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \quad (1.19)$$

二阶偏导数用中心差分格式近似,即

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{1}{h^2}(u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}) \\ \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \approx \frac{1}{h^2}(u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{h^2}(u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}) + \frac{1}{h^2}(u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}) = 0$$
(1.20)

整理得

$$u_{i,j} = \frac{1}{4}(u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1}) \quad (1.21)$$

对典型的抛物型偏微分方程,即

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \quad (1.22)$$

将 z 轴坐标用 i 表示,时间轴用 n 表示, h 为空间步长, $\Delta \tau$ 为时间步长,则左端向前差分格式为

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} = \frac{1}{\Delta \tau}(u_{i,n+1} - u_{i,n}) \quad (1.23)$$

右端中心差分格式为

$$\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = \frac{1}{h^2}(u_{i+1,n} - 2u_{i,n} + u_{i-1,n}) \quad (1.24)$$

整理得 $n+1$ 时层内节点值为

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta \tau}(u_{i,n+1} - u_{i,n}) &= \frac{\nu}{h^2}(u_{i+1,n} - 2u_{i,n} + u_{i-1,n}) \\ \Rightarrow u_{i,n+1} &= u_{i,n} + \frac{\nu \cdot \Delta \tau}{h^2}(u_{i+1,n} - 2u_{i,n} + u_{i-1,n}) \end{aligned} \quad (1.25)$$

对双曲型偏微分方程来说,即

$$\frac{\partial^2 u}{\partial \tau^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (1.26)$$

二阶偏导数用中心差分格式表述为

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u}{\partial \tau^2} \approx \frac{1}{k^2}(u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}) \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{1}{h^2}(u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{k^2}(u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}) + \frac{1}{h^2}(u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}) = 0$$
(1.27)

令 $r = \frac{c^2 k^2}{h^2}$, 整理得 $j+1$ 时各内节点值为

$$u_{i,j+1} = ru_{i+1,j} + 2(r-1)u_{i,j} + ru_{i-1,j} - u_{i,j-1} \quad (1.28)$$

1.3.3 解差分方程

解差分方程主要有高斯迭代法、高斯-赛德尔迭代法和逐步超松弛迭代法,下面以二维椭圆型偏微分方程为例介绍迭代过程。

1. 高斯迭代法

先给出域中节点 (i, j) 的 $u_{i,j}$ 初始值 $u_{i,j}^{(0)}$,然后 $k+1$ 次近似值用 k 次值表示为

$$u_{i,j}^{(k+1)} = \frac{1}{4}(u_{i+1,j}^{(k)} + u_{i-1,j}^{(k)} + u_{i,j+1}^{(k)} + u_{i,j-1}^{(k)}) \quad (1.29)$$

2. 高斯-赛德尔迭代法

为了加速高斯迭代法的收敛速度,用 $u_{i-1,j}^{(k+1)}$ 和 $u_{i,j-1}^{(k+1)}$ 分别代替 $u_{i-1,j}^{(k)}$ 和 $u_{i,j-1}^{(k)}$ 。因为对于 $k+1$ 次迭代,点 $(i-1, j)$ 和点 $(i, j-1)$ 的函数值总是先计算出来的,可以作为已知值,而 $k+1$ 次较 k 次的函数值更接近于真值,因此可以加快速度的收敛速度,迭代公式为

$$u_{i,j}^{(k+1)} = \frac{1}{4}(u_{i+1,j}^{(k)} + u_{i-1,j}^{(k+1)} + u_{i,j+1}^{(k)} + u_{i,j-1}^{(k+1)}) \quad (1.30)$$

3. 逐步超松弛迭代法

为了更进一步加速迭代的收敛速度,引入超松弛因子 ω ,即

$$u_{i,j}^{(k+1)} = u_{i,j}^{(k)} + \omega[(u_{i+1,j}^{(k)} + u_{i-1,j}^{(k+1)} + u_{i,j+1}^{(k)} + u_{i,j-1}^{(k+1)})/4 - u_{i,j}^{(k)}] \quad (1.31)$$

ω 的经验值为1.2~1.5。

设点 (i, j) 的 $k+1$ 次与 k 次的函数值之差为 $D_{i,j}$,则

$$D_{i,j}^{(k+1)} = u_{i,j}^{(k+1)} - u_{i,j}^{(k)} \quad (1.32)$$

然后按下式判别收敛性:

$$\max |D_{i,j}^{(k+1)}| < \epsilon \quad (1.33)$$

第 2 章 常见数值计算方法

2.1 常微分方程数值解法

龙格-库塔(Runge-Kutta)方法是一种在工程上广泛用于数值求解已知初值的微分方程的数值算法,由数学家卡尔·龙格和马丁·威尔海姆·库塔于 1900 年左右发明。

设常微分方程

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad (2.1)$$

当 $x = x_i$ 时, $y = y_i$, 则在 $x = x_i + \Delta x$ 处的 y_{i+1} 为

$$y_{i+1} = y_i + W_1 k_1 + W_2 k_2 \quad (2.2)$$

其中

$$k_1 = f(x_i, y_i) \Delta x \quad (2.3)$$

$$k_2 = f(x_i + p \Delta x, y_i + q k_1) \Delta x$$

二阶泰勒级数为

$$y_{i+1} = y_i + \frac{dy_i}{dx} \Delta x + \frac{1}{2!} \frac{d^2 y_i}{dx^2} (\Delta x)^2 \quad (2.4)$$

由

$$\frac{d^2 y_i}{dx^2} = \frac{d}{dx} \left(\frac{dy_i}{dx} \right) = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dx} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} f \quad (2.5)$$

整理得

$$y_{i+1} = y_i + \frac{dy_i}{dx} \Delta x + \frac{1}{2!} \left[\frac{\partial f(x_i, y_i)}{\partial x} + \frac{\partial f(x_i, y_i)}{\partial y} f(x_i, y_i) \right] (\Delta x)^2 \quad (2.6)$$

$\frac{dy}{dx} = f(x, y)$ 在 $f(x_i, y_i)$ 附近泰勒展开为

$$f(x_i + \Delta x, y_i + \Delta y) = f(x_i, y_i) + \frac{\partial f(x_i, y_i)}{\partial x} \Delta x + \frac{\partial f(x_i, y_i)}{\partial y} \Delta y$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{\partial^2 f(x_i, y_i)}{\partial x^2} \frac{(\Delta x)^2}{2} + \frac{\partial^2 f(x_i, y_i)}{\partial x \partial y} \Delta x \Delta y \\
 & + \frac{\partial^2 f(x_i, y_i)}{\partial y^2} \frac{(\Delta y)^2}{2} + \dots
 \end{aligned} \quad (2.7)$$

其中二阶项可以与高阶项一起忽略不计,则 $f(x_i + p\Delta x, y_i + qk_1)$ 的展开式为

$$f(x_i + p\Delta x, y_i + qk_1) = f(x_i, y_i) + \frac{\partial f(x_i, y_i)}{\partial x} p\Delta x + \frac{\partial f(x_i, y_i)}{\partial y} qk_1 \quad (2.8)$$

所以

$$\begin{aligned}
 k_2 &= f(x_i + p\Delta x, y_i + qk_1) \Delta x \\
 &= f(x_i, y_i) + \frac{\partial f(x_i, y_i)}{\partial x} p(\Delta x)^2 + \frac{\partial f(x_i, y_i)}{\partial y} qf(x_i, y_i)(\Delta x)^2
 \end{aligned} \quad (2.9)$$

于是得出

$$\begin{aligned}
 y_{i+1} &= y_i + W_1 k_1 + W_2 k_2 \\
 &= y_i + W_1 f(x_i, y_i) \Delta x + W_2 f(x_i, y_i) \Delta x \\
 &\quad + W_2 \left[\frac{\partial f(x_i, y_i)}{\partial x} p(\Delta x)^2 + \frac{\partial f(x_i, y_i)}{\partial y} qf(x_i, y_i)(\Delta x)^2 \right]
 \end{aligned} \quad (2.10)$$

为了得到在 $f(x_i, y_i)$ 附近展开的二阶泰勒级数的精确度,只须令

$$\begin{aligned}
 W_1 + W_2 &= 1 \\
 W_2 p &= \frac{1}{2} \\
 W_2 q &= \frac{1}{2}
 \end{aligned} \quad (2.11)$$

令 $p=1$, 得 $W_1 = \frac{1}{2}$, $W_2 = \frac{1}{2}$, $q=1$, 于是有二阶龙格-库塔式:

$$y_{i+1} = y_i + W_1 k_1 + W_2 k_2 = y_i + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \quad (2.12)$$

其中

$$\begin{aligned}
 k_1 &= f(x_i, y_i) \Delta x \\
 k_2 &= f(x_i + \Delta x, y_i + k_1) \Delta x
 \end{aligned} \quad (2.13)$$

要进一步提高精度,构造四阶龙格-库塔式,即

$$y_{i+1} = y_i + \frac{k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4}{6} \quad (2.14)$$

其中