


KEJI
JISUAN
FANGFA

科技计算方法

中村省一郎



原子能出版社

51.816

140

C.2

科技计算方法

及其在流体动力学和核系统中的应用

中村省一郎 著

尹 邦 华 译

许 汉 铭 校

(ZK495/28)

ZK495/21

原子能出版社

科技计算方法
及其在流体动力学和核系统中的应用

中村省一郎 著

尹 邦 华 译

许 汉 铭 校

原子能出版社出版

(北京2108信箱)

北京印刷一厂

(北京西便门)

新华书店北京发行所发行·新华书店经售

☆

开本 $850 \times 1168 \frac{1}{32}$ 印张 16·字数 350千字
1987年2月北京第一版·1987年2月北京第一次印刷
印数 1—3,800 ·统一书号: 15175·611
定价: 3.55元

内 容 简 介

本书全面地阐述了理工科中的微分方程的数值计算方法，重点介绍了有限差分法、有限元法和蒙特卡罗法。内容包括：常微分方程特征值问题的有限差分解；椭圆型、抛物型和双曲型偏微分方程的有限差分解；流体流动问题的有限差分解；加权剩余法及其在计算技术中的应用；有限元法及其在偏微分方程中的应用；加速迭代格式收敛的粗网格再平衡法；中子输运和传热问题的蒙特卡罗解等等。本书在取材上特别注意了与核反应堆设计和安全分析有关的计算方法。本书是自成体系的，它具有较强的工程性，联系实际广泛，适用面广。

本书可供从事核工程、流体动力学、传热学、化工等方面工作的技术人员和科研人员参考，也可供大专院校有关专业的师生参考。

前 言

本书介绍求解科学和工程技术中各类微分方程的数值计算方法,其中所涉及的计算方法大体上可以分为三类:有限差分法、有限元法和统计法(蒙特卡罗法)。从方程的类型来看,它包括常微分方程的特征值问题、椭圆型偏微分方程、抛物型和双曲型偏微分方程。

作者打算使本书成为一本自成体系的教材,供工科大学高年级学生和研究生使用,因而,注重内容的广泛性多于注重数学上的严密性。作者假定读者已具备线性代数、矩阵与向量运算的初步知识,并希望读者在其感兴趣的领域内的基本方程方面具备一些基础知识。例如,在讲授流体流有限差分方程时,本书并不叙述Navier-Stokes方程的推导,因此,读者在学习Navier-Stokes方程的数值解法之前,必须熟悉该方程的推导及其性质。

第一章介绍数值方法的基础。虽然假定读者已经具备一些线性代数和矩阵运算的知识,还是在该章内复习和概括了以后几章所用到的知识。第二至第四章叙述Sturm-Liouville特征值问题、椭圆型和抛物型偏微分方程的有限差分法。第五章叙述流体流的有限差分法。第六章至第八章叙述加权剩余法及其在计算技术中的应用。在第六章内介绍加权剩余法和变分原理。第七章叙述有限元法的原理及其在偏微分方程中的应用。在第八章内,将粗网格再平衡法作为一种加速第三章所述的迭代法的收敛速度的技术进行了介绍。作为一种数值计算的统计方法,在第九章内叙述中子输运和热传导的蒙特卡罗法。在第十章内讨论跨声速空气动力学分析的有限差分技术。

虽然在每章内都介绍了各种方法的种种具体应用,但总是尽可能从普遍性的角度来叙述导向这些具体应用的过程,如数值方程的推导及其求解的过程,从而,对于那些只想一般地了解计算方法的读者,这本教材也是有用的。本书也可供机械工程及核工程的学生使用。

对计算流体力学感兴趣的读者，应学习一至八章和第十章。阅读第一、六章和第七章，可以了解到有限元法的概貌。阅读一、二、三、四、七章和第九章的有关部分，可以学到关于稳态和瞬态热传导问题的计算技术。

迄今为止，核工程系所开设的数值分析课，一向是为反应堆物理计算服务的，然而，随着核反应堆设计技术不断成熟，人们更强调把重点放在电站的安全分析和经济运行的计算技术方面。鉴于这个原因，本书所叙述的各种计算方法，除中子学方面的计算以外，全都是和电站的安全分析密切相关的，并且，除第十章以外，对核工程师而言，都是重要的。因为这个缘故，作者深信，这本书是核工程方面的一本合适的教材。

中子运输的两个重要数值计算方法是有限差分法和蒙特卡罗法。在本书中仅介绍了后一种方法。这是因为：(1)关于中子运输的有限差分计算，已有若干本内容广泛的书和其它一些文献可供查阅；(2)较难找到一本包括近代技术的、中子运输蒙特卡罗计算的简明教材。

感谢我系的前系主任D. D. Glower博士的有益劝告和行政上的支持。作者与俄亥俄州立大学R. F. Redmond博士最早进行的讨论，以及在整个工作过程中他的鼓励，都是宝贵的。阿贡国家实验室的E. Gelbard博士的建议、和他进行的讨论，使我获益匪浅。在最后一章的编写过程中，NASA(国家航空和宇宙航行局)艾姆斯研究中心提供的参考资料很有价值。我要愉快地感谢我的学生们的帮助，尤其是Messrs. P. P. Su, R. H. Lubbers和R. M. Lell，他们校对了最后的手稿。大部分数值计算的例子，是直接或间接使用俄亥俄州立大学计算机教育和研究中心的IBM370/168计算的。最后，向Carol Edger小姐表示真诚的谢意，她在我写这本书的几年内耐心地打印了全部手稿。

中村省一郎 于俄亥俄，哥伦布

1977年1月

目 录

第一章	数值分析的基础	1
1.1	数值方法及其与解析解的基本区别	1
1.2	插值法	2
1.3	数值积分	11
1.4	差分逼近和差分算子	16
1.5	常微分方程初值问题的数值解	20
1.6	向量和矩阵	28
1.7	线性方程组	33
1.8	特征值和特征向量	37
1.9	相似变换和Jordan标准型	41
第二章	一维特征值问题的计算机解	55
2.1	常微分方程的边值问题和特征值问题	55
2.2	有限差分逼近	57
2.3	一个简单问题的特征向量和特征值的解析表达式	63
2.4	幂法	64
2.5	Wielandt法	68
2.6	一维Schroedinger方程	70
2.7	一维多群中子扩散方程	74
2.8	Chebyshev多项式法	78
第三章	解椭圆型偏微分方程的迭代算法	89
3.1	椭圆型偏微分方程	89
3.2	有限差分方程的推导	90
3.3	迭代解法及其矩阵表示形式	98
3.4	迭代格式的收敛性	106
3.5	迭代矩阵的基本性质	110

3.6	Jacobi 迭代法的性质	117
3.7	逐次超松弛(SOR)法.....	122
3.8	循环Chebyshev半迭代法.....	126
3.9	强隐法.....	130
3.10	二维中子扩散方程.....	138
第四章	抛物型偏微分方程的数值解.....	147
4.1	抛物型偏微分方程.....	147
4.2	差分方程的导出.....	148
4.3	差分方程的稳定性.....	151
4.4	截断误差和指数变换.....	155
4.5	Fourier稳定性分析	158
4.6	带有对流项的抛物型方程的稳定性.....	164
4.7	二维抛物型方程.....	166
4.8	考虑缓发中子的(一维和二维)时间相关中子扩散方程的 数值解.....	168
第五章	计算流体动力学——I.....	183
5.1	试验或计算.....	183
5.2	一维可压缩流的特征方程的导出.....	185
5.3	显式特征线法.....	189
5.4	隐式特征线法.....	194
5.5	容积控制法.....	202
5.6	用于二维不可压缩流的涡度法.....	210
5.7	MAC方法.....	216
第六章	加权剩余法和变分原理.....	225
6.1	作为近代计算技术的变分原理.....	225
6.2	加权剩余法.....	226
6.3	变分原理和Euler-Lagrange方程.....	232
6.4	基本泛函和直接法.....	236
6.5	特征值问题的变分原理.....	241
6.6	边界条件.....	244

6.7	尝试函数的选择和分片多项式的应用	251
6.8	半直接法和通量综合	255
第七章	有限元方法	267
7.1	有限元与有限差分	267
7.2	有限元和分片多项式	268
7.3	有限元方法在解椭圆型偏微分方程中的应用	273
7.4	有限元应力分析	282
7.5	粘性不可压缩流体流有限元方程的推导	292
7.6	流体流的非线性有限元方程的解	300
第八章	粗网格再平衡方法	311
8.1	粗网格再平衡的基本原理	311
8.2	分块和加权	313
8.3	粗网格再平衡方程的性质	321
8.4	粗网格再平衡效应的理论分析	327
8.5	计算实例	346
8.6	使用加法修正的粗网格再平衡	357
第九章	蒙特卡罗方法在粒子输运和传热问题中的应用	363
9.1	粒子的随机游动	363
9.2	用随机数决定事件	366
9.3	在相空间内的随机游动	371
9.4	记分法	379
9.5	积分输运方程和随机游动	384
9.6	伴随蒙特卡罗方法	387
9.7	非模拟蒙特卡罗方法	389
9.8	特征值问题	398
9.9	稳态热传导方程的蒙特卡罗解	401
9.10	通过表面密度技巧用蒙特卡罗方法解Laplace方程	406
9.11	瞬态热传导问题的蒙特卡罗解	411
第十章	计算流体动力学——II	425
10.1	空气动力流计算机模拟的范围	425

10.2	亚声速空气动力流的有限差分解.....	426
10.3	跨声速薄机翼摄动理论.....	433
10.4	跨声速薄机翼摄动方程的迭代解.....	439
10.5	跨声速方程的半迭代解.....	443
10.6	用逐次松弛法迭代求解精确的跨声速方程.....	450
10.7	Poisson方程的快速直接解(FDS)法.....	454
10.8	Cauchy-Riemann方程的快速直接解(FDS)法.....	460

附录

I.	伴随方程及其物理意义.....	468
II.	表面密度方程的伴随方程.....	481
III.	三角形有限元的积分.....	483
IV.	隐式特征线方法的迭代格式.....	485
V.	FDS方法的因式分解公式.....	488

索引

英汉人名对照表.....	490
汉英术语对照表.....	493

14

第一章 数值分析的基础

1.1 数值方法及其与解析解的基本区别

除非方程是极其简单的或是简化了的，否则，要以封闭形式解析地求解该方程多半是做不到的，尽管如此，但是推导描述物理现象或系统的方程并不需要任何硬件。在求解析解方面遇到的困难可以分成下列几种情况：

1. 算法简单，但方程的阶数或计算工作量太大；
2. 方程是多维的；
3. 几何形状复杂；
4. 不知道解析解或解析过程；
5. 有解析解，但它是复杂的和不经济的。

当你发现数学方程中只有一小部份有直接和解析形式的解时，确实会感到惊讶的。在历史上，工程师和科学家们曾摒弃对为数众多的、实际上复杂的系统作数学分析，而求助于实验的方法。显然，实验方法有种种限制，如实验误差和实验结果的粗糙性质等。此外，那些含有危险性或投资很大的实验，只是当失败的危险性小到可接受的程度时才能进行。当计算机得到改进和变得比较便宜时，才开始填补了解析解和实验方法之间的这道鸿沟。现今，在最先进的技术领域内，欲使计算机与系统的设计和分析分开已是不可能的了。例如，每当涉及到大型模型实验或建造工厂时，为了研究对象的静态和动态特性，以及为了选取最优设计参数，都要进行大量的计算机分析。只有通过计算分析才能求出宇宙飞船的最优飞行路线。核电站内假想事故的详细分析仅仅在计算上是可能的。而且，就数值分析更经济和更精确而言，它们

正在取代实验。这种趋势将随着数值方法解题能力的增长而愈加明显。事实上，可以预料，大量的流体动力学实验将为计算流体动力学分析所取代。

数值方法都是以算术运算为基础的数学方法，计算机就靠这种算术运算来计算数学方程的解。鉴于计算的数字性质，数值方法和解析方法之间有若干区别。其基本的区别在于连续的空间不可能用有限的磁芯存贮来表示，这就意味着：关于连续坐标的函数必须用有限个离散点上的函数值或有限个给定函数的集合来逼近。这里可以将数值方法划分成两种不同的方法：（1）确定性的方法，如有限差分法和有限元法；（2）概率性的方法，如蒙特卡罗（Monte Carlo）法。

求微分方程在固定节点上的数值解，是从寻求如何表示离散坐标上的解，以及如何在离散的空间内逼近微分和积分算子开始的。有限个相关变量可以用一向量来表示，微分或积分算子可以用矩阵来表示。因为这个缘故，在数值分析中，采用矩阵和向量记号的线性代数是特别重要的。

假定读者已学习过如参考文献 1 和 2 所介绍的基本的数值分析和线性代数。然而，奠定一个共同的基础还是值得的，为此，在以下各节将概括介绍基本的数值方法和线性代数。

1.2 插 值 法

如果只是在离散点 $\{x_i\}$ 上， $i = 0, 1, 2, \dots, I$ ，其中 $\{ \}$ 表示数的集合，函数 $f(x)$ 的值是已知的，而 $f(x)$ 的表示式却并未给出，那么，我们用插值公式可推算出 $f(x)$ 在其它点上的值。我们的讨论将限于多项式插值^{3,4}。假如只考虑两个离散点 ($I = 1$)，则插值公式是 x 的线性函数：

$$g(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} (f_1 - f_0) + f_0 = \frac{x_1 - x}{x_1 - x_0} f_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f_1, \quad (1.2.1)$$

其中 f_i 是 $f(x)$ 在 $x = x_i$ 上的已知值。

一般说来, 若给定 $f_i \equiv f(x_i)$, $i = 0, 1, 2, \dots, I$, 就可以得到 I 次多项式形式的插值公式

$$g(x) = \sum_{j=0}^I a_j x^j, \quad (1.2.2)$$

其中 a_j 为系数。因为可以使得 $g(x)$ 与 $f(x)$ 在 x 的 $I+1$ 个点上相一致, 所以我们有

$$f_i = \sum_{j=0}^I a_j x_i^j, \quad i = 0, 1, 2, \dots, I. \quad (1.2.2a)$$

靠求解以上方程来确定 a_j 。由此所得的多项式 $g(x)$ 可写成

$$\begin{aligned} g(x) = & \frac{(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_I)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)\cdots(x_0-x_I)} f_0 \\ & + \frac{(x-x_0)(x-x_2)\cdots(x-x_I)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)\cdots(x_1-x_I)} f_1 \cdots \\ & + \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{I-1})}{(x_I-x_0)(x_I-x_1)\cdots(x_I-x_{I-1})} f_I, \end{aligned} \quad (1.2.3)$$

上式称为 Lagrange 插值公式。易于看出, (1.2.3) 式是与 (1.2.2) 式等价的: $g(x)$ 是 x 的 I 次多项式, 且在 $I+1$ 个点 (x_i, f_i) 上, $i = 0, 1, 2, \dots, I$, 是精确的。因为 $g(x)$ 在 $I+1$ 个点是精确的, 所以, 若 $f(x)$ 为次数不超过 I 的多项式, 则 $g(x)$ 就成为精确的函数。若 $f(x)$ 不是 x 的多项式, 或是一个次数超过 I 的多项式, 那么, 除在 x_i 点以外, $i = 0, 1, 2, \dots, I$, $g(x) \neq f(x)$ 。

如果除 $\{f_i\}$ 外还给定 $f(x)$ 在 x_i 上的导数 $\{f'_i\}$, 则在 $\{x_i\}$ 上拟合两个序列的多项式就成为 $(2I+1)$ 次多项式。就离散点 $\{x_i\}$ 上的数值和导数而言这个多项式与 $f(x)$ 相一致。可以将这种多项式拟合推广以包括较高阶的导数, 这些多项式称为密切多项式或 Hermite 插值多项式⁵。用一高次多项式 (或等价地用 Lagrange 公式) 拟合一函数是不希望的。这是因为计算时间随阶次增加而迅速地增加, 而且还不保证给定函数很好地为一高次多项式所拟

合。不应把 Lagrange 公式应用于自变量区间很大的场合。在图 1.1 中给出一个不恰当应用 Lagrange 公式的例子。在图中画出了在 $0.5 \leq x \leq 5$ 范围内拟合 $y = x^{-2}$ 的 Lagrange 公式的误差。图 1.1 还表明，若把 Lagrange 公式用于外推，那是毫无把握的。若考虑比 $[0.5, 5.0]$ 小的 x 区间，同时重复地使用 Lagrange 公式，用 Lagrange 公式拟合 $y = x^{-2}$ 就会是相当成功的。

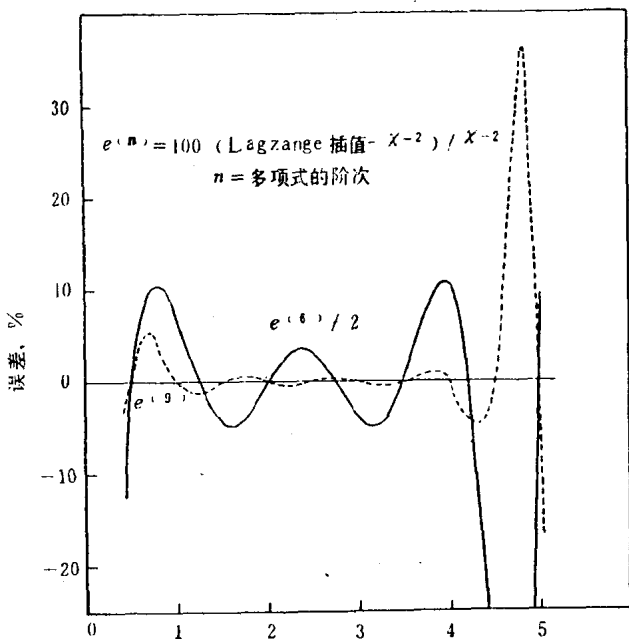


图 1.1 在 $0.5 \leq x \leq 5$ 内， $y = x^{-2}$ 的 Lagrange 插值的误差

以上考虑启发我们采用分片多项式方法。在这种方法中，在每个区间 $x_i \leq x \leq x_{i+1}$ 内重复地使用低次多项式。例如，若采用线性插值，则在每一区间 $x_i \leq x \leq x_{i+1}$ 内给定函数可近似表示为

原书中为 Legendre，——译校者注。

$$g_i(x) = \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} f_i + \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} f_{i+1} \quad (1.2.4)$$

在所讨论的整个区域 $x_0 \leq x \leq x_l$ 内, 拟合 $\{f_i\}$ ($i = 0, 1, \dots, J$) 的分片线性函数即(1.2.4)式可写成

$$g(x) = \sum_{i=0}^J f_i \eta_i(x), \quad (1.2.5)$$

其中 $\eta_i(x)$ 称为形状函数, 给定为

$$\begin{aligned} \eta_i(x) &= \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}, & x_{i-1} \leq x \leq x_i \\ &= \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i}, & x_i \leq x \leq x_{i+1} \\ &= 0, & x < x_{i-1} \text{ 或 } x > x_{i+1}, \end{aligned} \quad (1.2.6)$$

在图1.2中给出函数 $\eta_i(x)$ 及其导数。

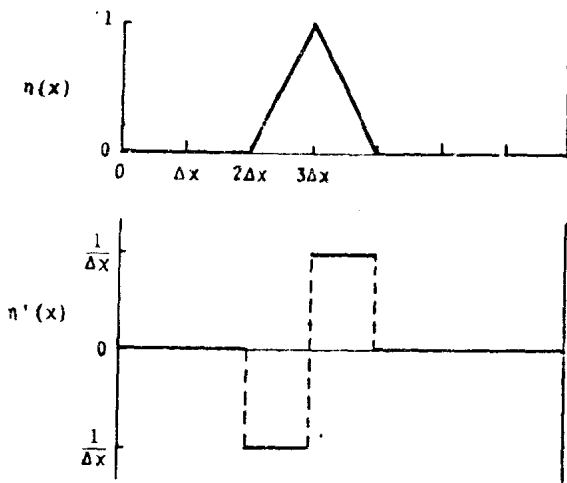


图 1.2 角锥函数及其导数

如果除 f_i 外还给出一阶导数 f'_i , 则在区间 $x_i \leq x \leq x_{i+1}$ 内拟合 f_i, f_{i+1}, f'_i 和 f'_{i+1} 的多项式为三次的, 并称之为三次多项式^{6.7}。

它给定为

$$g_i(x) = f_i u_i^{(0+)}(x) + f_{i+1} u_{i+1}^{(0-)}(x) + f'_i u_i^{(1+)}(x) + f'_{i+1} u_{i+1}^{(1-)}(x), \quad (1.2.7)$$

其中

$$u_i^{(0+)}(x) = 3 \left(\frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} \right)^2 - 2 \left(\frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} \right)^3, \quad (1.2.8a)$$

$$u_{i+1}^{(0-)}(x) = 3 \left(\frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} \right)^2 - 2 \left(\frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} \right)^3, \quad (1.2.8b)$$

$$u_i^{(1+)}(x) = \left[\left(\frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} \right)^2 - \left(\frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} \right)^3 \right] (x_{i+1} - x_i), \quad (1.2.8c)$$

$$u_{i+1}^{(1-)}(x) = \left[- \left(\frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} \right)^2 + \left(\frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} \right)^3 \right] (x_{i+1} - x_i), \quad (1.2.8d)$$

在 $x_0 \leq x \leq x_l$ 内拟合 $\{f_i\}$ 和 $\{f'_i\}$ ($i = 0, 1, \dots, l$) 的分片三次多项式可写成

$$g(x) = \sum_{i=0}^l f_i \eta_i(x) + \sum_{i=0}^l f'_i \xi_i(x), \quad (1.2.9)$$

其中

$$\begin{aligned} \eta_i(x) &= u_i^{(0-)}(x), \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i \\ &= u_i^{(0+)}(x), \quad x_i \leq x \leq x_{i+1} \\ &= 0, \quad \text{其它区域} \end{aligned} \quad (1.2.10a)$$

$$\begin{aligned} \xi_i(x) &= u_i^{(1-)}(x), \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i \\ &= u_i^{(1+)}(x), \quad x_i \leq x \leq x_{i+1} \\ &= 0, \quad \text{其它区域}, \end{aligned} \quad (1.2.10b)$$

在图1.3内画出了函数 η_i 、 ξ_i 、 η'_i 和 ξ'_i 的曲线。注意： $\eta_i(x_i) = \xi'_i(x_i) = 1$ 及 $\xi_i(x_i) = \eta'_i(x_i) = 0$ 。

般说来, 在区间的两个端点上拟合 p 阶导数的分片多项式可写成

$$g(x) = \sum_{n=0}^p [f_i^{(n)} u_i^{(n+)}(x) + f_{i+1}^{(n)} u_{i+1}^{(n-)}(x)], \quad (1.2.11)$$

其中 $u^{(n+)}(x)$ 和 $u^{(n-)}(x)$, $n=0, 1, \dots, p$, 全是 $2p+1$ 次多项式。(1.2.11) 式称为分片 Hermite 多项式。

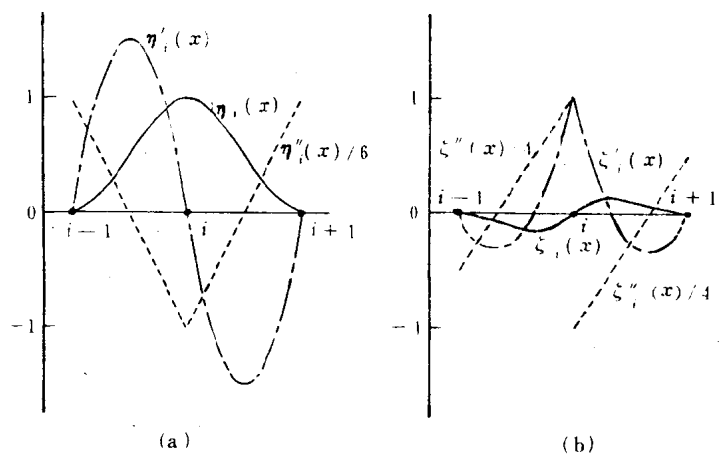


图 1.3 分片三次多项式的曲线 ($h_i = h_{i+1} = 1$)

甚至在没有给定 $\{f_i'\}$ 时也可用分片三次多项式拟合 $\{f_i\}$, $i=0, 1, 2, \dots, I$. 此时可以这样来确定 $\{f_i'\}$: 使得在 $\{x_i\}$ 上, $i=1, 2, \dots, I-1$, 分片多项式的二阶导数成为连续的。由此所得的分片三次多项式称之为三次样条⁸⁻¹⁰; 它们都是最光滑的分片三次多项式。

样条函数在 x_i 处的一阶导数, 如以下所述予以确定。除 $i=0$ 和 $i=I$ 外, (1.2.9) 式在 $x_i \pm \epsilon$ ($\epsilon \rightarrow 0$) 的二阶导数分别为

$$g''(x_i + \epsilon) = [u_i^{(0+)}(x_i + \epsilon)]'' f_i + [u_{i+1}^{(0-)}(x_i + \epsilon)]'' f_{i+1} + [u_i^{(1+)}(x_i + \epsilon)]'' f_i' + [u_{i+1}^{(1-)}(x_i + \epsilon)]'' f_{i+1}' \quad (1.2.12)$$