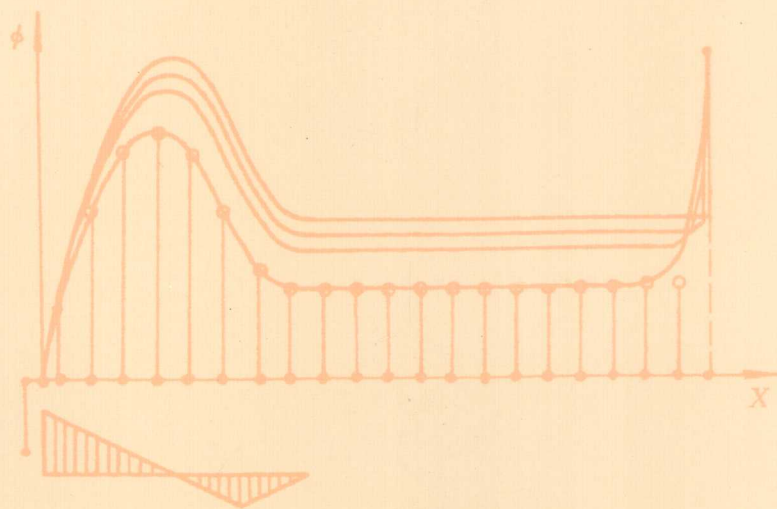


“十一五”国家重点图书 中国科学技术大学精品教材

计算热物理引论

► 吴清松 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

计算热物理引论

JISUAN REWULI YINLUN

吴清松 编著

中国科学技术大学出版社

内 容 简 介

本书较为系统地介绍了求解热物理问题的三种数值方法——有限容积法、有限差分法和有限元法,其中着重于介绍热物理中用得最多的有限容积法,全书共10章:第1章,绪论,介绍学科背景;第2~3章,为有限容积法和有限差分法的基础部分,重点讲述离散方法及其离散格式的定性性质;第4~7章,侧重于有限容积法,讲述数值方法在热物理问题中的应用;第8~9章,为提高部分,介绍代数解法和网格生成技术;第10章,讲述有限元法基础及其在热物理中的应用.全书内容取材广泛,层次分明,概念清晰,论述严谨,理实并重,适用性强.

本书可以作为理工院校热能动力工程专业高年级本科生和研究生教材,也可供相近专业师生以及工程技术人员和科研人员参考.

图书在版编目(CIP)数据

计算热物理引论/吴清松编著. —合肥:中国科学技术大学出版社,2009.9
(中国科学技术大学精品教材)

“十一五”国家重点图书

ISBN 978-7-312-02517-4

I. 计… II. 吴… III. 热学—计算方法—高等学校—教材 IV. O551

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2009)第 144483 号

中国科学技术大学出版社出版发行

地址 安徽省合肥市金寨路 96 号,230026

网址 <http://press.ustc.edu.cn>

安徽辉隆农资集团瑞隆印务有限公司印刷

全国新华书店经销

开本:710×960 1/16 印张:23 插页:2 字数:440 千

2009 年 9 月第 1 版 2009 年 9 月第 1 次印刷

印数:1—3000 册

定价:39.00 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 and 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

前 言

描述热物理过程(流动、传热传质、燃烧)的数学物理方程基本上都是非线性的偏微分方程组.除非极为简单的特殊情况,一般都不能通过解析分析的数学方法得到理论解.电子计算机的出现和蓬勃发展,为人们提供了用离散的数值模拟方法来解决问题的途径.计算热物理作为热物理、数值数学和计算机科学相结合的产物,已发展成热科学研究中独立于理论研究和实验研究的一种重要研究手段.

学习、掌握离散数值方法的基本理论及其在热物理学科中的应用,已经成为全面提高热物理专业学生素质、增强学生适应能力的一项重要内容.为此,中国科学技术大学从20世纪80年代起就在热物理专业的本科生和研究生中开设了相应的数值方法必修课程.本书根据作者多年来讲授这类课程的讲稿整理而成,目的在于为理工院校相近专业提供一本专业基础课教材,为未曾接触过数值计算的高年级本科生和研究生,有选择地介绍几种离散数值方法的基础理论及其在热科学中的应用.通过学习,使读者理解数值计算的基本原理,掌握数值计算的一些主要方法,能够理论联系实际,初步具有对热物理问题进行数值计算的能力,为进一步用数值方法从事热科学研究奠定基础.

热物理数值方法的内容很多,本书选择了发展相对成熟的有限容积法、有限差分法和有限元法,讲述了这些方法的基本概念、基本理论和基本方法.在应用于实际物理问题时,主要采用热物理中用得最为广泛的有限容积法.作为一部入门教材,所介绍的内容都是一些最基础的知识和方法.但有了这些基础,读者可以很容易地学习和掌握尚未列入本书的高深一些的相关内容和方法.

目 次

总序	(i)
前言	(iii)
第 1 章 绪论	(1)
1.1 热物理问题数值研究的起源和发展	(1)
1.2 热物理问题数值研究与理论、实验研究之间的关系	(3)
1.3 计算热物理研究的基本任务	(4)
1.4 本书内容梗概	(6)
参考文献	(7)
第 2 章 热物理问题的数学描述与偏微分方程的分类	(8)
2.1 热物理过程的控制方程	(8)
2.1.1 连续方程	(8)
2.1.2 动量方程	(9)
2.1.3 能量方程	(9)
2.1.4 化学组分方程	(11)
2.1.5 控制方程的通用形式	(11)
2.2 偏微分方程的物理分类和数学分类	(11)
2.2.1 偏微分方程的物理分类	(12)
2.2.2 偏微分方程的数学分类	(16)
2.2.3 解的适定和定解条件	(28)
参考文献	(30)
第 3 章 离散方法基础	(32)
3.1 解域离散	(32)
3.1.1 解域离散概念	(32)
3.1.2 网格节点设置方式和标识	(33)
3.1.3 网格生成过程需注意的问题	(35)
3.2 微分方程的有限差分法离散	(36)

4.3.1 充分发展的管流对流换热的物理意义	(116)
4.3.2 圆管内充分发展的对流换热	(117)
参考文献	(121)
第 5 章 对流扩散方程的数值方法	(122)
5.1 合理选择对流项离散格式的重要性	(122)
5.2 一维稳态对流扩散问题	(123)
5.2.1 模型方程的精确解	(123)
5.2.2 中心差分格式	(124)
5.2.3 一阶迎风格式	(125)
5.2.4 指数格式	(126)
5.2.5 混合格式	(128)
5.2.6 乘方律格式	(129)
5.2.7 五种三点式离散格式系数的统一表达形式	(130)
5.2.8 五种三点式离散格式计算结果比较	(135)
5.3 多维非稳态对流扩散问题	(136)
5.3.1 二维非稳态对流扩散方程的离散	(136)
5.3.2 三维非稳态对流扩散方程的离散	(139)
5.3.3 多维对流扩散问题的边界条件处理	(140)
5.4 对流扩散方程离散格式的虚假扩散问题	(141)
5.4.1 人工黏性引起的流向扩散	(141)
5.4.2 网格取向效应引起的交叉扩散	(141)
5.4.3 非常数源项引起的虚假扩散	(143)
5.5 对流项离散的高阶迎风型格式	(144)
5.5.1 二阶迎风型格式	(144)
5.5.2 三阶迎风型格式	(146)
5.5.3 QUICK 格式	(147)
5.5.4 对流项采用高阶格式时引出的新问题	(147)
5.6 对流扩散方程对流项离散格式的稳定性	(148)
参考文献	(149)
第 6 章 回流问题流动—传热耦合计算的数值方法	(151)
6.1 不可压缩流体流动—传热耦合问题数值计算概述	(151)
6.2 原始变量法顺序求解流场所遇困难及其解决途径	(152)
6.2.1 简化条件下原始变量法求解流场的控制方程	(152)

• viii •

7.1.1	湍流的复杂性	(188)
7.1.2	湍流的数值方法概述	(189)
7.2	湍流的 Reynolds 时均方程	(191)
7.2.1	湍流的“平均”概念	(191)
7.2.2	湍流 Reynolds 时均方程及其方程的封闭问题	(193)
7.3	零方程模型和一方程模型	(197)
7.3.1	零方程模型	(197)
7.3.2	一方程模型	(199)
7.4	$k-\epsilon$ 两方程模型	(201)
7.4.1	标准的 $k-\epsilon$ 两方程模型	(201)
7.4.2	改进的 $k-\epsilon$ 两方程模型	(205)
7.5	近壁区使用 $k-\epsilon$ 两方程模型	(209)
7.5.1	壁面函数法	(209)
7.5.2	低 Reynolds 数 $k-\epsilon$ 模型	(212)
7.6	Reynolds 应力方程模型	(214)
7.6.1	Reynolds 应力方程	(214)
7.6.2	二阶矩标量输运方程	(217)
7.6.3	Reynolds 应力模型的封闭方程组及其求解	(219)
7.6.4	Reynolds 应力方程模型对近壁面的处理	(220)
7.7	代数应力方程模型	(222)
	参考文献	(225)
第 8 章	离散化代数方程组的求解	(228)
8.1	代数方程组求解方法概述	(228)
8.2	拓展的三对角阵算法	(230)
8.2.1	块三对角阵算法	(230)
8.2.2	环形三对角阵算法	(232)
8.2.3	五对角阵算法	(234)
8.3	迭代解法的收敛性	(236)
8.3.1	迭代格式的一般构成方式	(236)
8.3.2	迭代法的收敛速度	(237)
8.3.3	判断迭代收敛的常用做法	(239)
8.3.4	影响迭代收敛速度的因素	(240)
8.4	加速迭代收敛的块修正技术	(241)

• X •

10.3.2	常用的几种加权余量法	(302)
10.3.3	Galerkin 加权余量法的积分表达形式	(306)
10.4	有限元法的基本原理和解题步骤	(310)
10.4.1	常规的 Galerkin 法或 Ritz 法求解微分问题所遇到的困难	(310)
10.4.2	有限元法的基本思想	(311)
10.4.3	有限元法的解题步骤	(311)
10.5	有限元法解题步骤分析	(312)
10.5.1	区域剖分	(313)
10.5.2	确定单元基函数	(314)
10.5.3	写出单元的积分表达式	(322)
10.5.4	单元分析	(323)
10.5.5	总体合成	(325)
10.5.6	边界条件处理	(327)
10.5.7	解总体有限元方程	(328)
10.6	非稳态平面导热问题的有限元法	(329)
10.7	对流扩散方程的迎风有限元法	(332)
10.7.1	基本思想和一维迎风有限元法	(332)
10.7.2	二维迎风有限元法	(337)
	参考文献	(340)
	习题	(341)

第 1 章 绪 论

20 世纪 40 年代,电子计算机的出现,逐步把人们带入到数字信息时代,与此同时,也改变了人们开展自然科学各个领域研究的模式.此前,自然科学各学科通常将其研究手段区分为理论研究和实验研究两种.随着计算机的发展,数值模拟逐渐发展成一种独立于理论和实验研究之外的全新手段,它可以用来解决理论和实验研究尚不能解决的许多复杂的实际问题.计算热物理作为热科学的一种新的研究手段,是热物理、数值数学和计算机科学交叉结合的产物,它以电子计算机为主要设备,采用离散化数值方法,对各种热物理问题进行数值模拟研究,以解决热科学中各种实际问题,揭示新的物理现象,开拓新的研究方向.计算热物理是一门有无限生命力的边缘科学.

1.1 热物理问题数值研究的起源和发展

一门学科的诞生,首先在于客观需求.热物理研究与流动、传热传质和燃烧相关的物理问题.控制热物理过程的方程基本上是非线性的,有的还具有复杂的边界条件,解析求解通常不可能.早在 20 世纪初,就有应用数学家提出了用差分离散方法和代数方程的迭代解法来求解偏微分方程问题,随后从理论上提出了差分方法的收敛性,使得对差分离散方法的认识上升到一个新的高度.但是,当时计算工具落后,热物理中即使一些相当简单的流动和换热问题,数值方法求解仍需要很长的时间,且难以达到满意的精度要求.

电子计算机的出现和快速发展,才使这种需求变成可能.高速度、大容量、多功能的计算机制成并广泛投入使用,为计算热物理的形成准备了条件.作为一门学

科,至今,它的发展大体上经历了以下三个阶段^[1]:

1. 初创奠基期(1946~1974 年)

计算机问世后,大量的数值算法,如有限差分方法中的算术平均格式、交替方向隐式格式、多维分裂格式等相继被提出.数值算法的理论研究,如格式的相容性、收敛性和稳定性分析,都取得了重要进展.世界上第一本大量介绍计算流体和计算传热学的杂志——*Journal of Computational Physics* 于 1966 年创办.一些耦合非线性问题的具体解法也有突破:1965 年美国科学家 Harlow 和 Welch 提出了交错网格的思想,有效解决了速度、压力存放在同一网格上时计算可能出现的两者失耦问题,促进了以速度、压力作为变量的原始变量法求解流场问题的发展;1972 年英国学者 Spalding 等人提出不可压缩流体速度—压力耦合问题顺序求解的 SIMPLE 算法,解决了压力没有独立的计算方程的困难;这期间,为有效克服对流项离散因采用中心差分格式出现的数值振荡问题,人们认识到采用迎风差分格式离散是一种合适方法;1974 年,美国学者 Thompson 等人提出了用微分方程方法生成贴体坐标网格的方法,为处理非规则边界条件的复杂计算问题创造了条件.所有这些,为计算热物理学科的发展奠定了基础,但这个阶段,受硬件和软件条件的限制,数值方法所能模拟的问题还十分有限,数值研究还只是理论研究和实验研究的辅助手段.

2. 蓬勃发展期(1975~1984 年)

随着硬件条件的飞速发展,计算速度和容量都得到迅速提高.学者们在进一步探讨新的数值算法和理论的同时,把研究投向工程应用,使得解决复杂工程问题的计算逐渐变为现实.理论和实际应用相结合,形成了“计算热物理”蓬勃发展的新时期.1977年,Spalding带领学生开发的求解二维边界层输运现象的 GENMIX 程序公开发表,其设计思想对以后的热科学通用软件开发有着积极的影响;1979年, *Numerical Heat Transfer* 杂志创刊,用于流动传热计算的大型通用软件 PHOENICS 问世,具有三阶计算精度的对流迎风型差分格式——QUICK 格式发表,且随后得到了广泛应用;1980年,Patankar 教授写的名著 *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow* 出版.该书条理清晰,内容精炼,说理透彻,为普及和推广计算热物理教学和研究提供了一本很好的教材.1981年,PHOENICS 软件正式投放市场,开辟了热物理商用软件的先河.随后,流体和热科学的其他商用软件,如 FLUENT、FIDAP 等也相继推出,使得学院式的研究成果真正走向工业应用.工业应用中的许多复杂新问题又不断反馈回来,要求进一步改进软件的设计和功能.随之,商用软件又不断更新版本.各种改进的 SIMPLE 系列算法先后提出;在吸收交错网格成功处理流动—压力耦合思想基础上,复杂边界问题在正交曲线坐标下

的同位网格方法计算也得到了成功的应用.数值方法,除了有限容积法、有限差分法之外,还发展了有限元法、边界元法及有限分析法.这个阶段,应用数值方法解决的问题范围越来越广泛,处理的问题越来越复杂,数值研究真正发展成为热科学的一种独立研究手段.

3. 深入发展期(1985 年至今)

最近的二十多年,随着计算模拟技术在工程界的应用日益普遍,计算热物理的研究继续向纵深发展.研究内容已涉及气、液、固多相并存的流动和换热,有化学反应的大型煤粉锅炉燃烧,湍流直接模拟和大涡模拟等.每秒数十亿、数百亿次计算能力的巨型计算机的出现,为解决这些复杂的热物理问题创造了条件.为配合这些高性能计算工具的应用,并行算法出现并得到发展.网格生成技术(前处理)、计算结果的绘图和可视化技术(后处理)受到重视,开发了许多供前、后处理的专用软件.个人计算机(PC)得到普及,其配置相当于 1985 年前的一台中型计算机,能进行多种热物理问题的模拟.为适应热科学深入发展的需要,新的计算热物理大型商用软件如 STAR-CD(1987)、CFX(1991) 等也相继投入市场;国际、国内的学术活动更加频繁;国际杂志 *Numerical Heat Transfer* 从 1985 年起就分为 A: Application 和 B: Fundamentals 两种刊物出版;新的国际杂志 *International Journal of Numerical Method in Heat and Fluid Flow* 于 1991 年创刊;数值计算方法正向精度更高、区域适应性更好、求解更健壮的方向发展.

1.2 热物理问题数值研究与理论、实验研究之间的关系

“计算热物理”作为研究热科学的一种新的手段,与传统的理论研究、实验研究间既不可分割,又互有区别^[2~5]:

(1) 三者目标一致,都是要探讨热科学中流体流动、传热传质和燃烧的基本规律.实验研究是理论研究和数值研究的基础,任何理论模型和数学模型的建立都依赖对热物理现象的观测和分析,而理论和数值结果是否准确又必须通过与实验结果比较才能确认.实验和数值研究需要理论研究的成果作指导,如任何实验都以相似理论做基础,目前数值研究所采用的大部分数学模型是以前理论研