

高等学校教材

固体火箭发动机工作过程的数值分析

蔡体敏 主编

西北工业大学出版社

13

√430-43
1

高等学校教材

固体火箭发动机 工作过程的数值分析

蔡体敏 主编

蔡体敏 何洪庆 王慧玉 张振鹏 周金仙 编

141287

西北工业大学出版社

1991年4月 西安

1030-43

内 容 简 介

本书共分六章，内容包括差分方法的基本理论，双曲型方程、抛物型方程和椭圆型方程的差分格式，有限元素法简介，固体火箭发动机内弹道、燃烧室和喷管流动、发动机内衬烧蚀以及喷管结构温度场的数值分析。本书可作为高等院校固体火箭发动机专业的教材，也可供有关科技人员参考。

固体火箭发动机

数值分析

编 者 蔡体敏

责任编辑 胡梦仙 责任校对 樊力

高等学校教材

固体火箭发动机工作过程的数值分析

主 编 蔡体敏

责任编辑 胡梦仙

责任校对 樊力

*

西北工业大学出版社出版

(西安市友谊西路127号)

陕西省新华书店发行

陕西省富平县印刷厂印装

ISBN 7-5612-0289-X/TJ·9(课)

103101

开本 787×1092 毫米 1/16 15.5 印张 1 插页 373 千字

1991年4月第1版

1991年4月第1次印刷

印数: 1—1420册

定价: 4.09元

前 言

随着计算机科学技术和数值计算方法研究的迅速发展,目前,在固体火箭发动机的设计与研制中,已比较普遍地采用了数值分析的手段。本教材作为固体火箭发动机专业本科教学的高年级选修课教材,参考学时为40学时,其目的是介绍基本的数值分析理论和方法,以提高利用计算机进行数值计算的能力。

本教材内容具有综合性、跨学科以及应用性强的特点,内容涉及到与固体火箭发动机整个工作过程相关的气动、传热以及计算数学、计算机软件等方面。要求学生先修的课程为固体火箭发动机原理、固体火箭发动机设计、气体动力学、传热学、算法语言、线性代数和计算方法等。

由于学时和教材篇幅的限制,本教材主要介绍发动机工作过程典型问题的数值分析方法。在固体火箭发动机原理及固体火箭发动机设计教材中已作介绍的基本内容及有关公式的推导,这里不再重复。关于喷管的二维轴对称两相流动计算,因其内容较适合于研究生课程,这里也不介绍。本教材共分六章,前两章为数值分析的基本理论与方法,主要介绍有限差分方法的基本理论,双曲型方程、抛物型方程和椭圆型方程的差分格式,以及网格生成和坐标转换等,同时也简单介绍有限元素法。后四章主要介绍发动机工作过程中典型问题的数值分析方法和算例,包括内弹道下降段、上升段和工作段的数值分析,燃烧室和喷管流场的数值分析,以及发动机内衬烧蚀和喷管结构温度场的数值分析。部分章后留有习题,供学生选作,以培养学生运用所学知识和方法去分析、解决设计和研制中实际工程问题的能力。为了配合学生上机作业,我们还可提供包括两个计算程序的软件,其所用的变量符号以及输入、输出参数等均在本教材中有所说明。

本教材对于从事固体火箭发动机学科的科研和设计工作的工程技术人员也具有参考价值。

全书由蔡体敏同志主编,其中第一章由王慧玉同志编写,第二章、第六章由蔡体敏同志编写,第三章由周金仙和张振鹏同志编写,第四章、第五章由何洪庆同志编写。本教材在编写过程中得到了国防科学技术大学方丁酉和戴绪恒同志的帮助,他们仔细地审阅了教材初稿,提出了不少宝贵的意见,在此表示感谢。

这本教材是固体火箭发动机专业和学科领域中的一本新教材,初次编写,难免有些缺点和错误,欢迎读者批评指正。

编 者

1990年9月

主要符号表

a	音速, 气膜厚度	Le	路易斯数
a_f	燃速系数	\dot{m}	质量流率, 化学反应的质量生成 (或消耗)率
a^*	临界音速	\dot{m}_b	燃气生成率
A	面积, 指前因子, 系数	\dot{m}_p	热解气体质量流率, 凝相质量流率
A_{bp}	药柱的已燃面积	\dot{m}_w	质量烧蚀率
B	无量纲烧蚀率, 系数	M	马赫数, 分子量
C	热容	\bar{M}	平均分子量
C^*	特征速度	n	时间层指标, 燃速的压强指数, 推进剂含铝百分数
C_D^*	修正的阻力系数	N	莫尔数
C_H	无量纲热传输系数	Nu^*	修正的努赛尔数
C_M	无量纲质量传输系数	p	压强
c	比热	Pr	普朗特数
c_p	定压比热	q	热流
d	直径	\dot{q}_{chem}	化学反应热流率
d_h	水力直径	\dot{q}_{conv}	湍流对流热流率
D	扩散系数	\dot{q}_f	层流对流热流率
e	单位体积的内能	\dot{q}_{int}	传入固体材料的热流率
E	活化能	$\dot{q}_{rad,net}$	燃气与烧蚀壁面间的净辐射热流率
f	热解气化分数, 摩擦系数	q_w	气流向壁面的传热损失
F	推力, 总气体分数	Q	源项
F_D	单位质量粒子相的阻力	Q_c	单位质量烧蚀带走的热量
ΔF_T^0	组分在化学反应中的自由能增量	r	半径, 推进剂燃速
g	重力加速度	r_0	不考虑侵蚀时的燃速
h	焓, 空间步长	\dot{r}	线烧蚀率
h_c	对流换热系数	$\dot{r}_{c,d}$	由扩散控制的线烧蚀率
h_r	恢复焓	$\dot{r}_{c,ch}$	由化学动力学控制的线烧蚀率
H	滞止焓	R	径向坐标, 气体常数
ΔH_p	热解潜热	Re	雷诺数
i	网格指标	s	熵, 弧长
j	网格指标, 质量扩散流率	S	通道周界, 侧面积
k	网格指标, 导热系数(仅在与化学 平衡常数 K 相混淆时用)	Sc	施密特数
K	导热系数, 质量分数, 湍流动能, 化学反应平衡常数	t	时间
l	长度	T	温度

T_{af}	平均薄膜温度	ξ, η, ζ	经变换的计算平面中的坐标
T_b	燃烧温度	ω	无量纲流函数, 迭代松弛因子
T_c	材料炭化温度	$\dot{\omega}$	热解速率
T_g^*	燃烧室内燃气温度	ε	辐射系数, 湍流耗散, 凝相与混合相质量流率之比, 反映坐标系统的指数
T_{in}	材料的初始温度	ε_s	当量砂粒粗糙度
T_p	材料热解温度	λ	特征值, 第二粘性系数
T_r	恢复温度	θ	无量纲温度
T_{wi}	材料开始烧蚀温度	σ	玻耳兹曼常数
u	速度的 x 方向分量, 轴向速度	σ_1	对流换热系数的修正因子
v	速度的 y 方向分量, 径向速度	上标:	
V	速度, 容积	k	迭代指标
w	速度的 z 方向分量	—	湍流中的时间平均值
x, y, z	直角坐标	\sim	湍流中的质量加权平均值
Y_i	组分浓度	下标:	
Z^*	非相等扩散驱动势	c	碳材料
α	组分反应分数, 热扩散系数, 系数	D	下游
β	系数	e	边界层外缘
γ	比热比	eff	有效值
$\Gamma_{\phi eff}$	扩散系数	g	燃气, 混合气体
δ	液体层厚度, 反映平面流或轴对称流的指数	i	组分
τ	剪切应力, 时间步长	ig	点火器燃气
ρ	密度	M	两相混合物, 中间值
$\bar{\rho}$	两相流中气相浓度	P	粒子参数
ρ_{mp}	粒子的材料密度	ref	参考值
ρ_T	推进剂密度	s	表面, 固体材料
μ	动力粘性系数	t	喉部
μ_t	湍流粘性系数	U	上游
ν	运动粘性系数	w	壁面
ϕ	位势函数, 独立变量	$-\infty$	材料内部
ψ	流函数, 引射因子	O	滞止值, 初始值

目 录

第一章 有限差分方法.....	1
§ 1-1 有限差分方法基础	1
§ 1-2 差分方程的相容性及解的收敛性和稳定性	10
§ 1-3 双曲型方程的差分格式	22
§ 1-4 抛物型方程的差分格式	30
§ 1-5 椭圆型方程的差分格式	34
§ 1-6 差分方法求解时初边值条件的处理	41
§ 1-7 网格设计与坐标转换	45
习题.....	55
第二章 有限元素法.....	58
§ 2-1 变分原理	58
§ 2-2 变分问题有限元素法	61
§ 2-3 迦辽金加权余数法	68
第三章 内弹道数值分析.....	74
§ 3-1 内弹道下降段的数值分析	74
§ 3-2 内弹道上升段的数值分析	88
§ 3-3 内弹道工作段的数值分析	96
§ 3-4 两相流动下内弹道工作段的数值分析.....	110
习题	121
第四章 燃烧室和喷管流动的数值分析	122
§ 4-1 用特征线法计算超音速喷管流动.....	122
§ 4-2 用时间相关法计算喷管流动.....	139
§ 4-3 燃烧室和喷管一维两相流动的一体化计算方法.....	152
习题	157
第五章 发动机内衬烧蚀的数值分析	158
§ 5-1 热化学烧蚀模型的数值分析.....	158
§ 5-2 反应湍流边界层烧蚀模型的数值分析.....	164
§ 5-3 液体层烧蚀模型的数值分析.....	181
§ 5-4 绝热层烧蚀的数值分析.....	186
第六章 喷管结构温度场的数值分析	197

§ 6-1	非炭化碳基复合材料的一维喷管温度场计算	197
§ 6-2	非炭化碳基复合材料的二维喷管温度场计算	204
§ 6-3	炭化复合材料的一维喷管温度场计算	214
§ 6-4	炭化复合材料喷管的二维温度场计算	223
§ 6-5	温度场与热化学烧蚀的耦合计算	232

参考文献 238

1. 1-1

2. 2-1

3. 4-1

4. 2-1

5. 0-1

6. 5-1

7. 2-1

8. 1-2

9. 5-2

10. 1-2

11. 3-1

12. 4-1

13. 1-1

14. 5-1

15. 2-1

16. 3-1

17. 4-1

18. 3-1

19. 4-1

20. 3-1

21. 4-1

22. 3-1

23. 4-1

24. 3-1

25. 4-1

26. 3-1

27. 4-1

28. 3-1

29. 4-1

30. 3-1

31. 4-1

32. 3-1

33. 4-1

34. 3-1

35. 4-1

36. 3-1

37. 4-1

38. 3-1

39. 4-1

40. 3-1

41. 4-1

42. 3-1

43. 4-1

44. 3-1

45. 4-1

46. 3-1

47. 4-1

48. 3-1

49. 4-1

50. 3-1

51. 4-1

52. 3-1

53. 4-1

54. 3-1

55. 4-1

56. 3-1

57. 4-1

58. 3-1

59. 4-1

60. 3-1

61. 4-1

62. 3-1

63. 4-1

64. 3-1

65. 4-1

66. 3-1

67. 4-1

68. 3-1

69. 4-1

70. 3-1

71. 4-1

72. 3-1

73. 4-1

74. 3-1

75. 4-1

76. 3-1

77. 4-1

78. 3-1

79. 4-1

80. 3-1

81. 4-1

82. 3-1

83. 4-1

84. 3-1

85. 4-1

86. 3-1

87. 4-1

88. 3-1

89. 4-1

90. 3-1

91. 4-1

92. 3-1

93. 4-1

94. 3-1

95. 4-1

96. 3-1

97. 4-1

98. 3-1

99. 4-1

100. 3-1

第一章 有限差分方法

在科研与生产实践中，用来描述一些实际问题的物理过程的数字表达式，一般来说是偏微分方程。从理论上讲，这些偏微分方程的解在方程描述的定义区间，应该是自变量（包括空间自变量和时间自变量）的连续函数，也就是说，方程的解可以表达成一个解析表达式。但是，实际情况是只有极少数几个特别简单、典型的微分方程才有解析解，并且在求这些解析解时还需用特殊的计算方法，其计算工作量都相当大。而科研及生产实践中得出的微分方程，一般来说都比较复杂，要得到它们的解析解是非常困难的，往往是不可能的。所以，对这些方程求解，只能求其定义区间内若干个离散点上的数值解来近似代替微分方程在这些点上的精确解。这样，就把在某个计算域内的一个连续的函数解，用一定的方法变成在该区域内若干离散点上的数值解来代替，这个过程称为离散近似过程。离散近似的方法很多，而用得较多的是有限差分方法和有限元法，本章先介绍有限差分方法及有关的概念。

§ 1-1 有限差分方法基础

有限差分方法是数值计算的基本方法之一。此方法的基本思想是：在自变量很小的间隔范围内，用差商近似代替微商，把要求解的原始微分方程离散化——把一个在计算域内连续的问题转化为在该区域内若干离散点的问题。这样就把微分方程转化为差分方程，也就把解微分方程的问题转化为解差分方程的问题，用求出在计算域内若干个离散点的差分方程的解近似地表示原微分方程在该点的解。

根据此基本思想，用有限差分方法求解微分方程时的程序是：第一步把微分方程的计算区域划分成所需的网格，得到若干个网格交点——离散点；第二步是把微分方程按一定的格式转化为差分方程，或者用其它方法直接构成差分方程；然后用得出的差分方程来求被划分成的各离散点的函数值。若以含空间自变量 x 和时间自变量 t 的偏微分方程为例，在其计算域内划分网格就是在 $x-t$ 平面内，按需要在 x 方向分成 I 份，即有 $I+1$ 条等 x 线，在 t 方向分成 N 份，即有 $N+1$ 条等 t 线，在整个计算区域内形成 $N \times I$ 个矩形网格，如图 1-1 所示。 x 和 t 方向的间隔各自可以是等间隔的，也可以是不等间隔的，根据需要而定。在没有特殊声明的情况下，认为 x 和 t 方向的间隔分别相等，即 x 方向的间隔 $\Delta x = h$ ， t 方向的间隔 $\Delta t = \tau$ ， Δx 和 Δt 分别称为 x 和 t 方向的步长。网格的交点称为节点或格点，这些节点就是

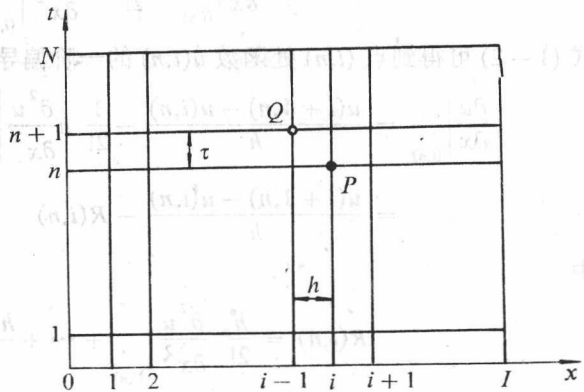


图 1-1 离散网格

所需的若干个离散点。每个节点可由其坐标指数命名，如图 1-1 中的 P 点可表示为 (i, n) 。同样， Q 点可表示为 $(i-1, n+1)$ ，等等。各节点的微分方程的精确解用符号 $u(i, n)$ 表示，差分方程的解用符号 u_i^n 表示。通过划分网格得到了所需的离散点，下一步就是如何用差商代替微商以构成所需的差分方程，下面介绍构成差商的方法及其精度。

一、用泰勒级数展开式构成差商及其精度

1. 一阶偏导数

通过泰勒级数展开的方法来获得偏微分方程的各种形式的差分方程，是最常用的一种方法。我们知道，若函数 $u(x, t)$ 在某一区域内是连续的，且有足够高阶的偏导数存在且连续，那么在此区域内，任意点 (x, t) 的邻点 $(x+h, t+\tau)$ 的函数值可展成任意点 (x, t) 的函数值的泰勒级数形式，为

$$u(x+h, t+\tau) = u(x, t) + \left(h \frac{\partial}{\partial x} + \tau \frac{\partial}{\partial t} \right) u(x, t) + \frac{1}{2!} \left(h^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \tau^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) u(x, t) + \dots \\ + \frac{1}{m!} \left(h^m \frac{\partial^m}{\partial x^m} + \tau^m \frac{\partial^m}{\partial t^m} \right) u(x, t) + \dots \quad (1-1)$$

为方便起见，只讨论 x 方向的偏导数，即认为式 (1-1) 中所有参数都位于第 n 时间层，那么，式中 $\tau=0$ ，对 t 的各阶偏导数也均为零，式 (1-1) 就变成

$$u(x+h, t_n) = u(x, t_n) + h \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{(x, t_n)} + \frac{1}{2!} h^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{(x, t_n)} + \dots + \frac{1}{m!} h^m \frac{\partial^m u}{\partial x^m} \Big|_{(x, t_n)} + \dots$$

式中各点用前面讲述的离散点的坐标来表示，则为

$$u(i+1, n) = u(i, n) + h \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{(i, n)} + \frac{1}{2!} h^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{(i, n)} + \dots + \frac{1}{m!} h^m \frac{\partial^m u}{\partial x^m} \Big|_{(i, n)} + \dots \quad (1-2)$$

由式 (1-2) 可得到点 (i, n) 处函数 $u(i, n)$ 的一阶偏导数为

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{(i, n)} = \frac{u(i+1, n) - u(i, n)}{h} - \frac{1}{2!} h \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{(i, n)} - \dots - \frac{1}{m!} h^{m-1} \frac{\partial^m u}{\partial x^m} \Big|_{(i, n)} - \dots \\ = \frac{u(i+1, n) - u(i, n)}{h} - R(i, n) \quad (1-3)$$

式中

$$R(i, n) = \frac{h}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{(i, n)} + \dots + \frac{h^{m-1}}{m!} \frac{\partial^m u}{\partial x^m} \Big|_{(i, n)} + \dots$$

式 (1-3) 中右边第一项是用点 $(i+1, n)$ 和 (i, n) 的函数值 $u(i+1, n)$ 和 $u(i, n)$ 表示函数 $u(x, t)$ 对变量 x 在点 (i, n) 处的一阶差商。通常把 x 的正向视为前方，此差商是用 $(i+1, n)$ 与 (i, n) 两点的差值表示的，故称此差商为向前差商，简称为前差。也就是说， $\frac{u(i+1, n) - u(i, n)}{h}$ 是函数 $u(x, t)$ 对自变量 x 在点 (i, n) 处的前差格式。式中 $R(i, n)$ 表示

用此差分格式近似地表示函数 $u(x, t)$ 在点 (i, n) 的一阶微商 $\frac{\partial u}{\partial x}$ 时的误差，也称为此差分格式

的截断误差，可用符号 $O(h)$ 表示。这里 O 为英文单词 *order* 的第一个字母，括号内步长 h 的次幂为截断误差 $R(i, n)$ 的表达式中 h 的最低次幂，刚好比 $R(i, n)$ 的表达式中最低阶偏导数的阶次低一阶，一般用它来表示所取差分格式的精度阶次。按此规定，可知式 (1-3) 表示的前差格式的精度是一阶的。若某一差分格式的截断误差 $R(i, n)$ 为 $O(h^2)$ ，则该差分格式为二阶精度，即截断误差符号的括号内步长的次幂就是所取差分格式的精度阶次。

上面介绍了用函数 $u(x, t)$ 在 $(i+1, n)$ 点的泰勒级数展开式得到了一阶偏导数 $\frac{\partial u}{\partial x}$ 在点 (i, n) 的前差格式。照此办法，用函数 $u(x, t)$ 在点 (i, n) 附近不同点的泰勒级数展开式，就可得到函数 $u(x, t)$ 在点 (i, n) 的各阶导数的不同形式的差分格式。若用函数 $u(x, t)$ 在点 $(i-1, n)$ 的泰勒级数展开式（这里仍然认为式中的参数是在同一时间层 t_n ）

$$u(i-1, n) = u(i, n) - h \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{(i, n)} + \frac{1}{2!} h^2 \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{(i, n)} + \dots + \frac{(-1)^m}{m!} h^m \left. \frac{\partial^m u}{\partial x^m} \right|_{(i, n)} + \dots \quad (1-4)$$

则可得函数 $u(x, t)$ 在点 (i, n) 的一阶偏导数 $\frac{\partial u}{\partial x}$ 的后差格式，为

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{(i, n)} &= \frac{u(i, n) - u(i-1, n)}{h} + \frac{1}{2!} h \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{(i, n)} + \dots + \frac{(-1)^m}{m!} h^{m-1} \left. \frac{\partial^m u}{\partial x^m} \right|_{(i, n)} + \dots \\ &= \frac{u(i, n) - u(i-1, n)}{h} + O(h) \end{aligned} \quad (1-5)$$

从式 (1-5) 的截断误差可知此差分格式也是一阶精度的。

式 (1-3) 表示的函数一阶偏导数的前差格式涉及到点 (i, n) 和 $(i+1, n)$ ，用到的是点 (i, n) 右侧的点的函数值；而式 (1-5) 表示的函数一阶偏导数的后差格式，用了点 (i, n) 和 $(i-1, n)$ 的函数值，都是点 (i, n) 左侧的点。可见，这两种差分格式都只用了两个点的函数值，所以称这两种差分格式为两点格式；又由于每种格式都只涉及到点 (i, n) 一侧的点的函数值，所以又称这两种差分格式是一侧差分格式。从几何观点来看，这两种差分格式都是用两个点之间线段的斜率近似作为函数 $u(x, t)$ 在点 (i, n) 处的斜率，精度自然不会很高，所以这两种差分格式都是一阶精度。

为提高所取的差分格式的精度，可以采用函数 $u(x, t)$ 在不同点的泰勒级数展开式的不同组合来构成新的差分格式。例如用式 (1-2) 减去式 (1-4)，消去级数展开式中偶次阶偏导数项后，可得函数 $u(x, t)$ 一阶偏导数的新形式的差分格式，为

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{(i, n)} &= \frac{u(i+1, n) - u(i-1, n)}{2h} - \frac{h^2}{6} \left. \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right|_{(i, n)} - \dots \\ &= \frac{u(i+1, n) - u(i-1, n)}{2h} + O(h^2) \end{aligned} \quad (1-6)$$

此差分格式由函数 $u(x, t)$ 在点 $(i+1, n)$ 和 $(i-1, n)$ 的函数值构成，称为中心差分格式，由 $O(h^2)$ 可知，此差分格式是二阶精度的，比式 (1-3) 和 (1-5) 表示的前差和后差格

式的精度高。从几何观点来看，此差分格式是用了点 $(i+1, n)$ 和 (i, n) 的斜率 $[u(i+1, n) - u(i, n)]/h$ 与点 (i, n) 和 $(i-1, n)$ 的斜率 $[u(i, n) - u(i-1, n)]/h$ 的平均值 $[u(i+1, n) - u(i-1, n)]/2h$ ，来近似表示函数 $u(x, t)$ 在点 (i, n) 的斜率，因此该差分格式的精度比前差分格式和后差分格式的精度高些。

根据中心差分格式精度较高的原因是因为用了点 (i, n) 两侧共三个点、两段线段的斜率的平均值来表示函数在 (i, n) 点的斜率的启示，可以用一侧三点的差分格式来提高差分格式的精度（与一侧两点的差分格式相比较）。用函数 $u(x, t)$ 在点 $(i+2, n)$ 和 $(i-2, n)$ 的泰勒级数展开式

$$u(i+2, n) = u(i, n) + 2h \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{(i, n)} + \frac{(2h)^2}{2!} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{(i, n)} + \cdots + \frac{(2h)^m}{m!} \left. \frac{\partial^m u}{\partial x^m} \right|_{(i, n)} + \cdots \quad (1-7)$$

$$\begin{aligned} u(i-2, n) = & u(i, n) - 2h \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{(i, n)} + \frac{(2h)^2}{2!} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{(i, n)} - \cdots \\ & + \frac{(-1)^m}{m!} (2h)^m \left. \frac{\partial^m u}{\partial x^m} \right|_{(i, n)} + \cdots \end{aligned} \quad (1-8)$$

分别与式 (1-2) 及 (1-4) 组合，可得函数一阶偏导数的三点向前及三点向后的差分格式，为

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{(i, n)} = \frac{-3u(i, n) + 4u(i+1, n) - u(i+2, n)}{2h} + O(h^2) \quad (1-9)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{(i, n)} = \frac{3u(i, n) - 4u(i-1, n) + u(i-2, n)}{2h} + O(h^2) \quad (1-10)$$

这两种差分格式的精度都是二阶的，与中心差分格式的精度相同。由此可得出：根据不同的需要，对函数 $u(x, t)$ 在点 (i, n) 附近各点的泰勒级数的展开式，进行不同的组合，可得到不同精度的差分格式。

2. 二阶及高阶偏导数

上面介绍的各种形式的差分格式，都是函数 $u(x, t)$ 在点 (i, n) 处的一阶偏导数的各种近似表达式。用同样的方法还可得到函数 $u(x, t)$ 在点 (i, n) 处的更高阶偏导数的差分

格式。我们先看函数 $u(x, t)$ 的二阶偏导数 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 的情况， $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 可以写成 $\frac{\partial(\frac{\partial u}{\partial x})}{\partial x}$ ，由此表

达式及前面推导一阶偏导数的差分格式的过程可知，要得出函数二阶偏导数的差分格式，至少要用到函数 $u(x, t)$ 在三个点处的函数值。我们可用式 (1-7) 与 (1-2) 组合，消去两式中的一阶偏导数项，可得函数 $u(x, t)$ 在点 (i, n) 处的二阶偏导数的向前差分格式，为

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{(i, n)} = \frac{u(i+2, n) - 2u(i+1, n) + u(i, n)}{h^2} + O(h) \quad (1-11)$$

此差分格式是一阶精度的。

若用式 (1-8) 与 (1-4) 组合，消去两式中的一阶偏导数项，可得函数 $u(x, t)$

在点 (i, n) 处的二阶偏导数的向后差分格式, 为

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{(i, n)} = \frac{u(i, n) - 2u(i-1, n) + u(i-2, n)}{h^2} + O(h) \quad (1-12)$$

同样, 此差分格式也是一阶精度的。

若用式 (1-2) 和 (1-4) 组合, 消去两式中一阶偏导数项, 可得函数 $u(x, t)$ 在点 (i, n) 处的二阶偏导数的中心差分格式, 为

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{(i, n)} = \frac{u(i+1, n) - 2u(i, n) + u(i-1, n)}{h^2} + O(h^2) \quad (1-13)$$

此差分格式是二阶精度的。

高阶偏导数的差分格式, 除了用函数 $u(x, t)$ 在各点的泰勒级数展开式直接进行组合得到外, 还可以用相邻的低阶差分的差来构成。为叙述方便, 引入一些常用的差式算子, 前差式算子用符号 Δ 表示, 后差式算子用符号 ∇ 表示。即一阶前差式为

$$\Delta u|_{(i, n)} = u(i+1, n) - u(i, n)$$

一阶后差式为

$$\nabla u|_{(i, n)} = u(i, n) - u(i-1, n)$$

二阶前差式可以用相邻的一阶前差式的差来构成, 即

$$\begin{aligned} \Delta^2 u|_{(i, n)} &= \Delta(\Delta u|_{(i, n)}) = \Delta(u(i+1, n) - u(i, n)) \\ &= \Delta u|_{(i+1, n)} - \Delta u|_{(i, n)} = u(i+2, n) - 2u(i+1, n) + u(i, n) \end{aligned}$$

同样, 二阶后差式可用相邻的一阶后差式的差来构成, 即

$$\nabla^2 u|_{(i, n)} = u(i, n) - 2u(i-1, n) + u(i-2, n)$$

以此类推, m 阶前差式或后差式可用相邻的 $(m-1)$ 阶的前差式或后差式的差来构成, 构成公式为

$$\Delta^m u|_{(i, n)} = \Delta(\Delta^{m-1} u|_{(i, n)})$$

$$\nabla^m u|_{(i, n)} = \nabla(\nabla^{m-1} u|_{(i, n)})$$

这样, 函数 $u(x, t)$ 的任意阶偏导数的向前及向后差分格式可表示为

$$\left. \frac{\partial^m u}{\partial x^m} \right|_{(i, n)} = \frac{\Delta^m u}{h^m} \Big|_{(i, n)} + O(h^P) \quad (1-14)$$

$$\left. \frac{\partial^m u}{\partial x^m} \right|_{(i, n)} = \frac{\nabla^m u}{h^m} \Big|_{(i, n)} + O(h^P) \quad (1-15)$$

这样组成的各阶偏导数的差分格式, 其精度阶数与所取的相邻的低阶差分格式相同, 所以式 (1-14) 和 (1-15) 中 $O(h^P)$ 的次幂 P 与所取相邻的低阶差分格式中截断误差中步长的次幂相同。

用差式算子表示的函数 $u(x, t)$ 各阶偏导数的中心差分格式为 m 为偶数时

$$\left. \frac{\partial^m u}{\partial x^m} \right|_{(i,n)} = \frac{\nabla^m u|_{(i+m/2,n)} + \Delta^m u|_{(i-m/2,n)}}{2h^m} + O(h^2) \quad (1-16)$$

m 为奇数时

$$\left. \frac{\partial^m u}{\partial x^m} \right|_{(i,n)} = \frac{\nabla^m u|_{(i+(m-1)/2,n)} + \Delta^m u|_{(i-(m-1)/2,n)}}{2h^m} + O(h^2) \quad (1-17)$$

式中 $O(h^2)$ 是针对所用的前差算子 Δu 、后差算子 ∇u 的精度为二阶的情况。

3. 二阶混合偏导数

对于二阶混合偏导数 $\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t}$ ，可以写成 $\frac{\partial(\frac{\partial u}{\partial x})}{\partial t}$ ，对照前面二阶偏导数的推导过程可知，此差商仍可用泰勒级数展开式组合而成，在 x 和 t 方向至少各用两个点的函数值，可得

$\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t}$ 的中心差分格式，为

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} \right|_{(i,n)} = \frac{u(i+1, n+1) - u(i+1, n-1) - u(i-1, n+1) + u(i-1, n-1)}{4h\tau} + O(h^2, \tau^2) \quad (1-18)$$

此差分格式是二阶精度。

二阶混合偏导数除式 (1-18) 的格式外，还可以根据需要，用函数 $u(x, t)$ 在各点的泰勒级数展开式组合成各种差分格式，这里不一一陈述。

4. 非均匀步长时的偏导数

前面介绍的各阶偏导数的差分格式，都是对等步长 ($\Delta x = h, \Delta t = \tau$) 而言的。在实际应用中会遇到不规则的边界节点或移动边界的情况，就需要用变步长的网格计算，如图 1-2 所示的情况。对点 (i, n) 来说，其 x 方向的步长为 h_1 和 h_2 ， t 方向的步长为 τ_1 和 τ_2 ，为方便起见，仍只讨论 x 方向的偏导数。函数 $u(x, t)$ 在 x 方向点 $(i+1, n)$ 及点 $(i-1, n)$ 的泰勒级数展开式为

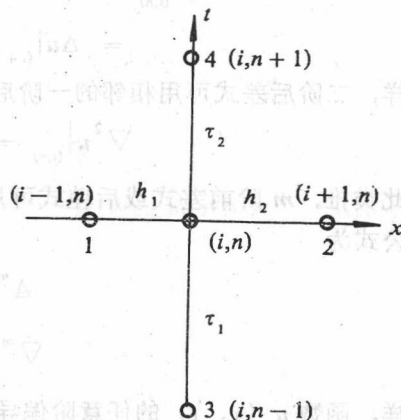


图 1-2 非均匀步长网格

$$u(i+1, n) = u(i, n) + h_2 \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{(i,n)} + \frac{h_2^2}{2!} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{(i,n)} + \dots$$

$$u(i-1, n) = u(i, n) - h_1 \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{(i,n)} + \frac{h_1^2}{2!} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{(i,n)} - \dots$$

由此两式消去 $\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{(i,n)}$ 项，可得

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{(i,n)} = \frac{h_1^2 u(i+1,n) - h_2^2 u(i-1,n) - (h_1^2 - h_2^2)u(i,n)}{h_1 h_2 (h_1 + h_2)} + O\left(\frac{h_1^2 h_2 + h_1 h_2^2}{h_1 + h_2}\right) \quad (1-19)$$

若用上述两式消去 $\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{(i,n)}$ 项, 则可得

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{(i,n)} = \frac{h_2 u(i-1,n) + h_1 u(i+1,n) - (h_1 + h_2)u(i,n)}{\frac{1}{2} h_1 h_2 (h_1 + h_2)} + O\left(\frac{h_1^3 + h_2^3}{h_1 + h_2}\right) \quad (1-20)$$

式 (1-19) 及 (1-20) 就是对于非均匀步长时的函数 $u(x, t)$ 的一阶偏导数和二阶偏导数的中心差分格式。用同样的方法, 还可得到非均匀步长时函数 $u(x, t)$ 的一阶偏导数的三点向前差分格式, 为

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{(i-1,n)} = \frac{-h_2(2h_1 + h_2)u(i-1,n) + (h_1 + h_2)^2 u(i,n) - h_1^2 u(i+1,n)}{h_1 h_2 (h_1 + h_2)} + O(h_1^2, h_2^2) \quad (1-21)$$

同样, 在 t 方向也可得到所需的各阶偏导数的各种差分格式。由式 (1-19) — (1-21) 可见, 当取均等步长, 即 $h_1 = h_2$ 时, 则得

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{(i,n)} &= \frac{u(i+1,n) - u(i-1,n)}{2h} + O(h^2) \\ \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{(i,n)} &= \frac{u(i-1,n) - 2u(i,n) + u(i+1,n)}{h^2} + O(h^2) \\ \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{(i-1,n)} &= \frac{-3u(i-1,n) + 4u(i,n) - u(i+1,n)}{2h} + O(h^2) \end{aligned}$$

这与前面的式 (1-6), (1-13), (1-9) 完全一致。

这里值得提醒的是, 各阶偏导数的各种差分格式有不同的精度, 精度越高, 差分格式的表达式越复杂。在实际应用中, 一般用四阶精度以下的差分格式, 而最常用的是二阶精度的各种差分格式。这是因为格式的精度高, 表达式复杂, 计算时带入的其它误差多, 其计算结果的精度不一定高。

从上面的论述得出, 要得到函数 $u(x, t)$ 的各阶偏导数的差分格式并不困难, 只需将函数 $u(x, t)$ 在点 (i, n) 附近各点的泰勒级数展开式, 按需要进行组合及截取就行。有了各阶偏导数的差分格式, 就可将原微分方程中的各项偏导数项用各种差分格式近似代替, 就可把微分方程转化为所需的差分方程。

【例 1-1】 微分方程 $\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$, 写出对此微分方程的时间偏导数项取前差格式,

对空间二阶偏导数项取中心差分格式的差分方程。

解: 根据题目的要求, 对时间变量的一阶偏导数项取前差格式, 为

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u(i, n+1) - u(i, n)}{\tau} + O(\tau)$$

对空间变量的二阶偏导数项取中心差分格式, 为

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u(i+1, n) - 2u(i, n) + u(i-1, n)}{h^2} + O(h^2)$$

所以，原微分方程的差分方程为

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\tau} - \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n - u_{i-1}^n}{h^2} = 0$$

显然，此差分方程所取的差分格式，时间项精度是一阶的，空间项精度是二阶的。

二、用控制体积法直接构成差分方程

用控制体积法直接构成差分方程就不是从偏微分方程出发，取各项偏导数的差分格式来构成差分方程，而是直接根据宏观的物理定律来直接得出差分方程。

我们只考虑一维情况，在某物理量 $u(x, t)$ 场的空间 i 附近取一个控制体积 CV，如图 1-3 所示。如果认为该场对物理量 $u(x, t)$ 的输运，既有流体的宏观运动——迁移造成，又有流体分子的微观运动——扩散造成，迁移速度为 c ，扩散系数为 α 。那么，在 Δt 时间内，控制体积 CV 内该物理量的总增量 Γ 应有两部分组成：一是由流体迁移造成的净增量 Γ_1 ；二是由流体分子扩散造成的净增量 Γ_2 。即

$$\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2 \quad (1-22)$$

在 Δt 时间内，控制体 CV 内该物理量的总增量 Γ 可表达成

$$\Gamma = u_i^{n+1} \Delta x \Delta y \Delta z - u_i^n \Delta x \Delta y \Delta z$$

在 Δt 时间内，控制体 CV 内由流体迁移造成的该物理量的净增量 Γ_1 ，可用流体流入界面 $i - \frac{1}{2}$ 及流出界面 $i + \frac{1}{2}$ 的通量来表示，为

$$\Gamma_1 = [(cu)_{i-\frac{1}{2}} - (cu)_{i+\frac{1}{2}}] \Delta y \Delta z \Delta t$$

在 Δt 时间内，控制体 CV 内由流体分子扩散造成的该物理量的净增量 Γ_2 ，可用同样的方法推导得到，流体分子扩散通量速率与扩散系数 α 的关系为 $-\alpha \frac{\partial u}{\partial x}$ ，所以

$$\Gamma_2 = \alpha \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2}} - \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i-\frac{1}{2}} \right] \Delta y \Delta z \Delta t$$

把 Γ ， Γ_1 ， Γ_2 的表达式代入式 (1-22)，就得到

$$(u_i^{n+1} - u_i^n) \Delta x \Delta y \Delta z = [(cu)_{i-\frac{1}{2}} - (cu)_{i+\frac{1}{2}}] \Delta y \Delta z \Delta t + \alpha \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2}} - \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i-\frac{1}{2}} \right] \Delta y \Delta z \Delta t \quad (1-23)$$

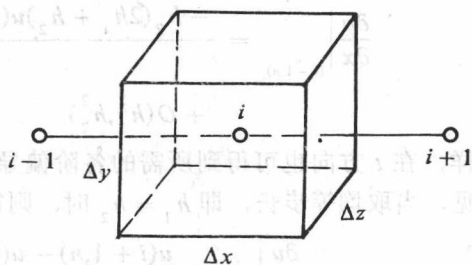


图 1-3 i 点的控制体积 CV

若取

$$(cu)_{i\pm\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}[(cu)_{i\pm 1}^n + (cu)_i^n]$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i+\frac{1}{2}} = \frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x}$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i-\frac{1}{2}} = \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x}$$

将这些表达式代入式(1-23), 整理后得

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = -\frac{(cu)_{i+1}^n - (cu)_{i-1}^n}{2\Delta x} + \alpha \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} \quad (1-24)$$

这就是用控制体积法直接得到的差分方程, 它与输运方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

中对时间偏导数项取前差格式, 对空间偏导数项取中心差分格式所得出的差分方程

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + c \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} = \alpha \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{(\Delta x)^2}$$

几乎一样, 所不同的是由控制体积法得出的差分方程中 (cu) 是组合在一起的, 是守恒型的。守恒型差分方程是以宏观的守恒定律为基础, 不是以连续数学为根据。在求解有些实际问题时, 守恒型的方程是有它特殊意义的。

三、误差的概念

用数学方法解决实际问题时, 往往会带入不少误差。那么, 在整个过程中, 哪些环节会引入误差呢? 首先, 用数学表达式(又称数学模型)来描述具体的实际问题的物理过程时, 总要作许多简化, 所以在建立描述实际问题的数学表达式时就会引入误差, 此种由“简化”带来的误差称为模型误差; 一般的数学表达式中通常有一些“常数”, 这些常数通常是观测得到的数据或经验数据。就是说, 这些数据不会是绝对准确的, 是有误差的, 这类误差称为观测误差。模型误差和观测误差都是在建立描述实际问题物理过程的数学表达式中已经存在的, 这里不作详细介绍。

对已建立的、描述实际问题物理过程的数学表达式进行求解时, 一般来说, 这些数学表达式都是很复杂的偏微分方程。前面已讲过, 这种偏微分方程不易获得解析解, 而要用各种离散近似的方法进行数值解, 在此求解过程中, 包含两种主要的误差: 一是离散误差; 二是舍入误差。仍以含两个自变量 x, t 的偏微分方程为例, 用有限差分方法离散原微分方程, 以 $u(i, n)$ 表示原微分方程的精确解, 以 u_i^n 表示差分方程的精确解, 那么, 此两个精确解的差 $u(i, n) - u_i^n$ 称为离散误差。显然, 此误差是由原微分方程离散化而引入的。当然, 离散方法不同, 此误差也不同, 所以又称此误差为方法误差。从前面介绍的有限差分方法中可知, 离散误差实际上就是截断误差。在微分方程离散成差分方程后, 用计算机进行数值求解时,