

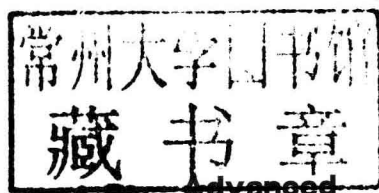
► 郭宽良 陈志坚 李昌烽 左 然 编著

高等传热和流动问题的 数值计算

Advanced
Numerical Heat Transfer and Fluid Flow

高等传热和流动问题的 数值计算

郭宽良 陈志坚 李昌烽 左 然 编著



**Numerical Heat Transfer
and Fluid Flow**

图书在版编目(CIP)数据

高等传热和流动问题的数值计算 / 郭宽良等编著
. —镇江: 江苏大学出版社, 2012. 5
ISBN 978-7-81130-316-2

I. ①高… II. ①郭… III. ①传热—数值计算 IV.
①TK124

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 032401 号

高等传热和流动问题的数值计算

编 著/郭宽良 陈志坚 李昌烽 左 然
责任编辑/吴昌兴
出版发行/江苏大学出版社
地 址/江苏省镇江市梦溪园巷 30 号(邮编: 212003)
电 话/0511-84443089
传 真/0511-84446464
排 版/镇江文苑制版印刷有限责任公司
印 刷/扬中市印刷有限公司
开 本/718 mm×1 000 mm 1/16
印 张/17.5
插 页/2
字 数/320 千字
版 次/2012 年 5 月第 1 版 2012 年 5 月第 1 次印刷
书 号/ISBN 978-7-81130-316-2
定 价/39.00 元

如有印装质量问题请与本社发行部联系(电话:0511-84440882)

序 言

伴随着计算方法的革新,出现了各种模拟计算机,直到电子数字计算机的兴起,无论在计算速度和计算容量以及计算性能方面,都已取得质的飞跃,这促使传热和流动数值计算快速发展演变为“计算传热学”这一分支学科。

原中国科学技术大学郭宽良教授自上世纪 70 年代就开始有限元数值计算方法的探索,1980 年作为访问学者公派去美国从事计算传热学研究。回国后,翻译出版了美国 S. V. Patankar 教授的名著《传热和流体流动的数值方法》(安徽科学技术出版社,1984),编著了《计算传热学》(中国科学技术大学出版社,1988),并在中国科技大学和中国科学院研究生院设课讲授。1988 年再次去美国,在阿拉巴马州的大学(UAH 和 A A&M U)就职,专门从事传热和流动领域的计算研究工作 10 余年。现与江苏大学能源与动力工程学院李昌烽特聘教授和左然教授,以及在美国专门从事传热和流动数值计算研究的 CFDRC 公司陈志坚高级主任工程师合作,总结长期以来的研究力作,编著了《高等传热和流动问题的数值计算》一书。全书共六章:第一章扼要回顾数值计算方法,给出 12 个算例及计算所需的方程和条件;第二章专门阐述有限容积法及其应用和推广;第三章专章讨论化学反应流动;第四章简要介绍有限元方法;第五章阐述蒙特卡洛模拟方法;第六章汇集不同领域的数值模拟方法。每章均含有典型算例,各章都附有基本参考资料,以供研究者学习时钻研思考。

在全稿付印出版之际,写此序言,算是简略的介绍。

中国科学院院士 王补宣

2011 年 8 月于清华园

前 言

上世纪 70 年代中,我开始从事有关温度场的有限元方法的探索.自那以后的近 30 年里,一直在国内外从事传热和流动的数值计算研究.从 1982 年开始,在中国科技大学工程热物理系和中国科学院研究生院,为大学本科生和研究生开设和讲授了数值计算传热学,直到 1988 年去美国;还曾在中国科学院的工程热物理所和广州能源所讲授了短期的计算传热学课程.出版了译自美国 S. V. Patankar 教授名著的《传热和流体流动的数值方法》(安徽科学技术出版社,1984),编著了《数值计算传热学》(安徽科学技术出版社,1987),并与孔祥谦、陈善年两位教授编著了原国家教委工程热物理专业教材委员会推荐教材《计算传热学》(中国科学技术大学出版社,1988)等.在这些年的科研和教学实践以及国内外的经历当中,我一直考虑,要为研究生编著一本他们需要的好教材.

2009 年 4 月,我对江苏大学作了短暂的访问,并应邀作了有关传热和流动数值计算研究的基本功的专题讲座,受到了热烈的欢迎.因此,我决定和江苏大学能源与动力工程学院李昌峰特聘教授及左然教授,以及在美国专门从事传热和流动数值计算研究的 CFDRC 公司陈志坚高级主任工程师,合作为有关专业的研究生编写一本“高等传热和流动问题的数值计算”教材.经过近三年的积极准备,反复讨论,不断地补充和修改,书稿最后编写完成,并由江苏大学出版社正式出版发行.另三位作者都在国外取得了博士学位,并在国内外从事数值计算的教学和科研工作很多年.可以说,本书是我们四人长期从事传热和流动问题数值计算的科研和教学工作的经验与体会的一个总结.

在本书的总体结构和安排上,读者不难发现,它有别于其他同类的图书.根据多年从事数值计算的科研和教学的经验,我们认为,做好数值计算的基本功表现在以下四个能力:(1) 物理模型简化和数学表达的能力;(2) 应用数值方法的能力;(3) 编写和应用程序以及展示计算结果的能力;(4) 对计算结果进行物理分析的能力.在一般的教材中,这些内容都讨论得较少.因此,在本书的第一章

中,根据我们切身的体会,专门讨论了这四个方面的问题,它们是数值计算的最基本、最核心的内容.该章的最后一节给出了12个典型算例及其数值计算结果,以及求解这些问题所需的方程和条件,以便于读者练习.第二至第五章则是介绍具体的数值计算方法,第六章讨论不同领域的数值模拟.希望这样的编排,能对读者有更实际的帮助.

我们知道,传热和流动问题的数值计算已广泛地用于能源、动力、化工、交通、航空、航天、建筑、环保、生物和医学工程等传统专业,并且在不断出现的新技术、新材料、新工艺等新领域的研究和开拓中,也日益显露其重要的作用.为了使本书具有较好的针对性和更大的适应面,即希望它不仅是相关专业研究生的教材,而且还是从事上述传统专业以及新领域工作的工程技术和科研人员的参考书,在编著本书时,我们力求把重点放在最新实用的数值方法上,尽量从应用的角度介绍所给出的数值方法,不过分地追求数学上的严格性和作繁琐的推导,另外在每章中还利用小算例辅以数值方法的说明.在取材上,兼顾基础、实用和拓展三个方面,既注重传热和流动问题数值计算的基本知识和当前的实用方法,又在一定程度上反映数值计算在新领域中的最新进展.书中还包括了化学反应流动,蒙特卡洛直接模拟方法,以及微流体、聚合酶链反应、神经元、湍流减阻和半导体材料的晶体生长等重要领域的数值模拟内容,以适应不同读者的需求.

借本书出版之际,首先要感谢著名的工程热物理界老前辈,中国科学院王补宣院士为本书作序,以及他对学科发展和教材建设的重视.同时,向中国科学院徐建中院士和中国工程院范维澄院士对本书的热情推荐深表谢意.向中国科学技术大学葛新石教授和陈义良教授致谢,他们认真地阅读了书稿,并提出了一些宝贵的修改意见.感谢江苏大学和能源与动力工程学院,以及江苏大学出版社对本书的出版所给予的热情鼓励和大力支持.其次,向中国科学技术大学校友、SIMERICS公司的姜瑜和丁辉表示谢意,他们认真阅读了本书的部分书稿并提供了高水平的典型算例.最后,但不是最少,还要向江苏大学能源与动力工程学院流体力学、工程热物理、流体机械与工程等专业的研究生致谢,他们为本书的出版付出了辛勤的劳动并做出了不可或缺的贡献.作者李昌烽和左然感谢国家自然科学基金(项目编号:10672069,11072091,60376006,61176009)和江苏大学对他们科研工作的支持.

限于我们的水平,书中难免有错误和不当之处,恳请批评指正.

郭宽良 代作者

于 Huntsville, AL, USA

目 录

第一章 数值计算的基本要点 001

- 1.1 物理模型的简化和数学的表达 002
 - 1.1.1 物理模型的简化 002
 - 1.1.2 通用方程 003
 - 1.1.3 初始条件和边界条件 005
- 1.2 数值方法的要点 006
 - 1.2.1 求解区域和网格构造 006
 - 1.2.2 离散化方法 007
 - 1.2.3 离散化方程的求解 017
- 1.3 计算机程序和计算结果的展示 018
- 1.4 计算结果的物理分析和讨论 019
- 1.5 典型算例 020
 - 1.5.1 同心圆套管内的自然对流 021
 - 1.5.2 二维垂直封闭腔体内的自然对流 023
 - 1.5.3 二维水平狭窄封闭腔体内的自然对流 025
 - 1.5.4 上板移动引起的二维腔体内的流动 027
 - 1.5.5 二维后台阶层流流动 028
 - 1.5.6 水锤效应 029
 - 1.5.7 卡门涡街 032
 - 1.5.8 涡圈蛙跳 037
 - 1.5.9 一维理想激波管流动 038
 - 1.5.10 二维亚声速有缓冲面的流动 041
 - 1.5.11 二维跨声速有缓冲面的流动 043
 - 1.5.12 二维超声速有缓冲面的流动 045
- 参考文献 046

第二章 流体力学基本方程组的数值求解 048

2.1 流体力学基本方程组 048

2.2 有限容积法 050

2.2.1 网格划分 050

2.2.2 非稳态项 053

2.2.3 对流项 055

2.2.4 扩散项 057

2.2.5 压力梯度项 058

2.2.6 界面速度 059

2.2.7 压力修正方程 062

2.2.8 SIMPLE - C 算法 064

2.2.9 最终离散化方程 066

2.3 多维流动 067

2.3.1 预估速度 067

2.3.2 速度修正 072

2.3.3 压力修正方程 072

2.4 边界条件 076

2.4.1 进口边界 077

2.4.2 出口边界 078

2.4.3 壁面边界 080

2.4.4 对称边界 081

2.5 离散化方程的求解 081

2.5.1 惯性松弛和线性松弛 081

2.5.2 顺序迭代解法 082

2.5.3 耦合同步解法 084

2.6 高阶精度格式 089

2.6.1 空间高阶精度格式 089

2.6.2 时间高阶精度格式 094

2.7 可压缩流动 098

2.8 湍流模型 103

2.9 应用推广	108
2.9.1 多孔介质流动	108
2.9.2 一维激波管流动	113
2.9.3 颗粒两相流	116
参考文献	123

第三章 化学反应流动 126

3.1 化学反应和特征时间	127
3.2 化学组分和当量反应速率	128
3.3 组分守恒方程和热耦合	132
3.4 化学平衡反应流	134
3.4.1 化学势	134
3.4.2 平衡组分计算	136
3.5 有限速率反应流	140
3.5.1 常微分方程预估解	142
3.5.2 偏微分方程修正解	150
3.6 算例：超声速绕流	153
参考文献	155

第四章 有限元方法 157

4.1 有限元方法的出发方程	157
4.2 单元划分和离散化	160
4.3 单元的总合成	164
4.4 源项的处理	167
4.5 非稳态项的处理	169
4.6 离散化方程求解	171
4.7 算例	173
参考文献	177



第五章 蒙特卡洛直接模拟方法 178

- 5.1 两个简单引例 178
- 5.2 蒙特卡洛直接模拟 181
 - 5.2.1 直接模拟方法的应用前提 181
 - 5.2.2 流体的宏观物理量和分子的运动参数 182
 - 5.2.3 直接模拟方法的基本步骤 184
- 5.3 算例：一维正激波结构 189
- 参考文献 196

第六章 若干领域的数值模拟 197

- 6.1 微流体 197
- 6.2 电场模拟 199
- 6.3 电渗流 204
- 6.4 电泳流 208
- 6.5 聚合酶链反应 214
- 6.6 PID 控制器 215
- 6.7 介电泳运动 219
- 6.8 双曲热传导 224
- 6.9 神经元初步 228
- 6.10 颗粒和湍流的相互作用 234
- 6.11 高分子稀溶液湍流减阻 240
- 6.12 半导体材料的晶体生长 249
- 6.13 MOCVD 反应器内的传热与传质 255
- 参考文献 262

符号表 267

彩色附图 插页



第一章 数值计算的基本要点

传热和流动问题的数值计算过程就是对基于传热和流动问题建立的物理模型所得到的偏微分方程组,利用数值方法(有限容积法或有限元法等)将其离散化为代数方程组,并借助于计算机求解,最后得到传热和流动问题的数值解.这是一种数值求解方法,它不能取代实验研究,但是,它和实验研究紧密结合,越来越成为解决各类复杂传热和流动问题的一种非常有效的手段.

随着近代计算机技术的飞速发展和数值方法的不断完善更新,传热和流动问题的数值计算取得了突破性的进展.现在已经能对血管内的血液流动,爆炸引发的高温高压冲击波的传播等现象作出比较可信的数值模拟.由于并行算法的采用,更能对包括天气变化,局部海洋流动,整架飞机的绕流,汽车碰撞导致的大变形等复杂问题作出初步的预测.随着湍流模型的逐渐完善,对复杂湍流现象可以作出较准确的数值计算.通过多台计算机联机的并行算法,对一些简单的湍流流动,也可不借助于湍流模型,直接求解流体力学方程组而得到较好的湍流流场.不仅如此,数值计算已被广泛地用于复杂的超大规模半导体芯片的设计与制造,微流体技术、纳米材料的使用、新药的研制、新陈代谢过程以及神经信号传递等方面的研究.在这些新技术和新领域中,各种不同的物理现象耦合在一起,因此,传统意义上的传热和流动问题的数值计算实际上已经成为多重物理学科的数值计算,可以预料,它的研究和应用将会迎来更加广阔的前景.

为了便于读者总结回顾已学过的数值方法,也为了更好地理解和掌握在本书其他章节中即将讨论的数值方法,并有利于今后进一步开展有关传热和流体流动问题数值计算的研究和应用,本章将扼要地讨论和概括有关数值计算方法的基本要点,即物理模型的简化和数学表达,离散化方法和求解,计算机程序和

计算结果的展示以及计算结果的物理分析和讨论. 在最后一节将给出一些典型问题的计算实例.

1.1 物理模型的简化和数学的表达

1.1.1 物理模型的简化

面对一个复杂的传热流体流动问题,如何建立物理模型,如何求解? 有两种策略性的选择:一种是“一步到位”,即根据给出的物理问题写出与质量、动量和能量传递有关的所有方程加以求解. 而另一种是“多步到位”,即将给出的物理问题尽可能简化,从简化的情况出发,然后逐步增加其复杂性,最终“还原”到求解给定的物理问题. 如求解的是三维问题,可先求解一维或二维,最终求解三维问题;如求解的是多相流动问题,可先解单相流动,然后再做两相或多相;如求解的是有化学反应的问题,则先解无化学反应问题,再考虑化学反应;如求解的是多组分问题,则先考虑单组分,然后求解多组分问题;如求解的是湍流问题,则先解层流问题,然后再考虑湍流;如求解的是可压缩流动问题,则先求解不可压流动,然后再求解可压流动等等. 对于复杂的几何结构也是一样,如物体是管簇问题,先求单管的,再考虑两个管和多管的,然后求解整个管簇问题;如求解的是射流管加挡板问题,则先求解射流管,然后再加上挡板等等. 总之,“多步到位”的方法就是从一个较简单,易于求解的简单情况出发,逐步增加其求解的因素,最终求解给定的传热流动问题.

“多步到位”的可取之处在于:

(1) 简单问题易于求解,并可深入地了解其物理本质、变量之间的内在联系以及各个参数相互间的影响关系.

(2) 从简单的问题出发,每增加一种考虑因素,就可以很方便地得到这种影响因素对其结果的影响,如有问题也较容易发现和解决.

(3) 前一步的计算结果可以作为下一步计算的试探值,使迭代计算较易收敛.

(4) 可以经过较短时间取得阶段性的研究结果和成果.

因此,推荐读者采用“多步到位”的求解策略. 至于采用几步到位,这取决于传热和流动问题的复杂性,以及个人从事数值计算的经验. 对于初学者来说,还是从较简单的情况出发,由简单到复杂,由浅入深为好.

在写出物理模型的质量、动量和能量守恒方程的同时,还应尽可能地对方程

进行简化. 简化过程主要包括: 采用某些容许的近似假设, 进行坐标或变量变换以及化成无量纲形式等三个方面. 简化的目的是在可能的条件下, 或将偏微分方程化为常微分方程, 或使坐标数目减少, 或将非线性问题化为线性问题, 或使待求的方程数减少, 或将有量纲的方程化成无量纲形式, 以使数值求解更加简便和有效.

在传热和流动问题中, 通常所用到的近似假设是当问题不依赖于时间, 或变量随时间的变化很小时, 即可假定为稳态问题, 这时有 $\partial/\partial t = 0$. 一般地, 传热流动问题是三维的, 但当在一个方向上的长度为无限, 或较另两个方向上的长度长很多时, 那么在这个方向上的两个端部边界的影响可被忽略, 这时可假定为二维问题. 如果只需考虑一个方向上端部的影响, 就可看做一维问题. 另外, 在传热和流动问题中经常涉及介质的热物性 (如导热系数、密度、比热、粘性系数等), 这些特性可能会由于介质本身结构的不均匀性、方向性, 以及介质内部温度场、浓度场等原因而随时间和空间变化, 这时必须转化为变物性问题处理. 如果在所讨论的条件下, 它们随时间或空间的变化极其微小并可略去, 这种情况下就可视为常物性问题. 上述的“稳态”、“一维”、“二维”和“常物性”等假定是经常应用的.

对于某些外部流动问题, 也常可采用边界层近似假设, 这时该问题就转化为边界层流动. 对通道内的流动, 若可忽略入口段影响, 则可假定流动是充分开展的, 或同时假定温度场也是充分开展的. 在讨论对流换热时, 由于流速较低, 往往将粘性耗散略去. 另外, 对一般流体的通道内流动, 也常常假定横向导热是主要的, 可以忽略在流动方向上的导热影响. 在处理自然对流问题时, 除了计算浮升力影响时必须考虑流体密度的变化, 其余均假定为常物性.

总之, 以上所作出的各种容许的近似假设, 旨在使物理模型得以简化, 从而使这些问题的数学描述比较简便.

1.1.2 通用方程

对传热流动问题进行数值计算, 和用其他理论求解方法一样, 只有当实际的传热流动问题可以给出数学描述时, 才能进行理论预测. 因此, 对给定的传热流动问题, 首先要写出它的控制方程和定解条件. 有了这个前提, 才能利用正确的数值方法, 借助于电子计算机, 得到反映传热和流动问题过程内涵的数值结果, 获得其几何参数、初始状态、工质物性、流动状况和边界条件等对系统内的温度分布和速度分布及其变化规律以及边界处的粘性力和热流或换热系数等的影响关系.

传热和流动问题的数学描述,一般都基于待求系统所遵循的守恒定律或平衡原理,即满足质量守恒、动量守恒以及能量守恒原理.在用微分方程表达这些守恒原理时,应恰当地选取坐标系,使得坐标系和待求系统的几何形状相适应,并兼顾到问题的物理特征(如取运动坐标或固定坐标,轴对称问题或二维问题等).

本节将讨论传热和流动问题的控制方程及其定解条件.由于基本方程在一般的传热学或流体力学教科书中已有详尽的推导,这里仅加以概括.

处理传热和流动问题需要求解质量、动量、能量守恒的联立方程组,为了便于研究和编制通用的计算机程序进行求解,质量、动量和能量守恒方程可用如下的通用方程表示,即:

$$\frac{\partial(\rho\Phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \Phi) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \Phi) + S, \quad (1-1)$$

式中, ρ 为密度, $\mathbf{v}$ 为速度向量, Φ 为待求变量, Γ 为变量 Φ 的扩散系数, S 为源项^[1-3].

由式(1-1)可以看出,通用微分方程一般包含4项,即非稳态项、对流项、扩散项和源项.因变量 Φ 可以表示不同的量,它可以是化学组分的质量分数、热焓或温度、速度分量、湍流动能等,相应地可以得到这些因变量的扩散系数 Γ 和源项 S (如表 1-1 所示).

表 1-1 各类方程中与因变量 Φ 对应的扩散系数 Γ 和源项 S

方 程	Φ	Γ	S
连续性方程	1	0	0
x 方向的动量方程	u	μ	$-\frac{\partial P}{\partial x} + B_x + V_x$
化学组分方程	m_i	Γ_i	R_i
能量方程	h (或 T)	k (或 $\frac{k}{C_p}$)	S_h (或 $\frac{S_h}{C_p}$)
湍流-动能方程	K	Γ_K	$G - \rho \varepsilon$

值得注意的是:

(1) 将任意一个微分方程化为通用微分方程时,对于选定的因变量只要使非稳态项、对流项和扩散项符合标准形式即可.在扩散项中, $\nabla \Phi$ 的系数就是 Γ , 右端的其他项合在一起定义为源项;

(2) 并不是 Φ 的所有扩散流量都是由 Φ 的梯度决定的,除了用 $\nabla \cdot (\Gamma \nabla \Phi)$ 表示的扩散项以外,其他扩散流量一概都表达成源项 S 的一部分;



(3) 写成这种通用的微分方程形式,其目的就是为了在计算时可以编制通用的计算机程序,给计算带来方便;

(4) 在用有限容积法求解流动问题的通用计算机程序中,一般都采用物理坐标,即通常的直角坐标系。

1.1.3 初始条件和边界条件

为了使上述控制方程的解唯一地被确定下来,还必须给出相应于具体传热流动问题的初始条件和边界条件。

初始条件就是待求的非稳态问题在初始时刻待求变量的分布,它可以是常值,也可以是空间坐标的函数。在非稳态过程一开始,初始条件的影响很大,但随时间的推延,它的影响将逐渐减弱,并最终达到一个新的稳定状态。在最终的稳定状态解中再也找不到初始条件影响的痕迹,而主要由边界条件决定。因此,对稳态问题的求解是不需要初始条件的。甚至对非稳态问题来说,若对每个时刻的瞬态解不感兴趣,而只要求最终达到的稳态解的话,那么就能舍弃具体传热流动问题给出的真实初始条件,而人为地假定初始条件。这是因为最终稳态解只取决于边界条件,而和初始条件无关。这样做,可以节省较多计算工作量和计算时间。同样,对稳态问题也可作为非稳态问题求解,结果将是一样的。

关于边界条件的给定,通常有三类:第一类边界条件是给出边界上变量值, $\Phi|_w = \Phi|_0$; 第二类边界条件是给出边界上变量的法向导数值,如 $\frac{\partial \Phi}{\partial n}|_w = B_1$; 第三类边界条件是给出边界上变量与其法向导数的关系式,如 $\left[A_1 \frac{\partial \Phi}{\partial n} + A_2 \Phi\right]_w = B_2$, 其中, A_1, A_2 为常数, Φ_0, B_1, B_2 可以是常值,也可以是时间的函数,如周期性函数等。在给定具体边界条件时,要特别注意以下几种常用的边界:

(1) 绝热边界。这是一种常见的第二类边界条件,此时有 $B_1 = 0$, 即 $\frac{\partial T}{\partial n}|_w = 0$ 。

(2) 对称边界。当待求问题的几何形状和边界条件,以及流场和温度场等存在着某种对称关系时,只需在部分区域上求解,就可以获得整个求解域上的结果。这时出现了对称边界问题,这样的边界类同于绝热边界。在对称边界上,变量的值只有一个,其法向导数值等于零,即 $\frac{\partial \Phi}{\partial n}|_w = 0$, 其切向导数值不一定为零。

(3) 非滑动边界. 在求解流场时, 常需给出速度(或流函数、旋涡度)的边界条件. 对于非滑动边界, 它的所有速度分量都为零, 因此流函数值为常数, 但旋涡度一般都不等于零, 需根据其定义进行计算.

(4) 有对流和辐射换热的边界. 这是一种典型的第三类边界条件, 它可表达为

$$-k \frac{\partial T}{\partial n} = \alpha_c (T - T_s) + \sigma \bar{F} (T^4 - T_s^4),$$

式中, T_s 为流体和环境的温度; $\bar{F}$ 为常值, 它与边界表面和环境的发射率、空间角系数以及它们的面积比等因素有关. 由于上式是非线性关系式, 通常的做法是将其线性化, 如化为

$$-k \frac{\partial T}{\partial n} = (\alpha_c + \alpha_r) (T - T_s) = \alpha (T - T_s),$$

式中, $\alpha_r = \sigma \bar{F} (T + T_s) (T^2 + T_s^2)$, 若边界温度和环境温度相差不大, 则 $\alpha_r \approx 4\sigma \bar{F} T_s^3$; α 为包括对流和辐射在内的换热系数.

(5) 耦合边界. 一般在处理复合材料、固液(或气液)两相等问题时, 常将它们作为一个整体求解较为简便. 但应保证在材料性质不连续的耦合边界上变量值只有一个, 且其流量值(传热、传质和动量交换的流量)也只有一个. 此时, 变量的梯度往往是不连续的.

(6) 远下游边界. 在远下游边界处, 如流体是流出的, 则设定流体的表压力为零; 如流体是流入的, 则需给定流体的速度.

(7) 周期性边界. 当流体的流场呈周期性, 即出口处的流体速度、压力和温度等都与进口处的相等, 这时的边界可用周期性边界条件处理.

(8) 无粘流边界. 当忽略流体的粘性效应时, 壁面应作无粘流边界处理, 即可设定壁面的法向速度为零, 其物理量的法向梯度为零.

应该指出的是, 对剪切流动、可压缩流动、化学反应流动、湍流流动等问题的边界条件的给定和处理较为复杂, 可见本书的有关章节或参考文献.

1.2 数值方法的要点

1.2.1 求解区域和网格构造

为了数值求解偏微分方程和给定的初始条件和边界条件, 首先需要确定求解区域并构造相应的网格. 一般来说, 很难一次就能得到非常合适的求解区域和

相应的网格,常常需要通过多次试算,不断地调整和改进.因此,可以说试算是确定求解区域和网格构造的重要方法.

对于求解区域的确定,以下三点需要注意:

(1) 在很多情况下,可以用直线或平面构造求解区域,但又有很多情况不适宜用直线或平面来构造,因为求解区域的确定必须顾及物体表面的几何形状.如果物体表面是曲线或曲面,那么用相应的曲线或曲面构造求解区域更为合理.

(2) 在确定求解区域大小时,必须确保在求解区域的上游、下游及侧面等所有边界处满足给定的边界条件,在计算过程中或是在得到最后结果时必须检查在所有边界处是否满足给定的边界条件.

(3) 求解有回流区域的问题时,必须使求解区域的边界离回流区足够远.

对于网格的构造,不论是用代数方程或是常微分方程生成的网格,不论采用的是规则网格或是不规则网格,是正交网格或是非正交网格,是固定网格或是运动网格,是均匀网格或是非均匀网格,都需注意以下三点:

(1) 尽可能地构造有正交性的规则网格,它有精度高且处理简便的优点.

(2) 在处理复合材料或两相问题时,必须将网格的控制容积面取在材料性质不连续的耦合边界面上,不容许在一个网格或单元内含有两个不同物性的材料(双流体流动除外).

(3) 在变量梯度大,精度要求比较高的地方需布置较精密的网格,即安排较多的网格点.

1.2.2 离散化方法

对于偏微分方程的求解,只有在非常简单的情况下,可以用分离变量或积分变换法求其严格解,或用摄动法求其得近似解,一般情况下,只能用数值方法求其用数值表示的近似解.

通常对偏微分方程离散化可以有两种选择:其一是直接将每个微分项用差分项代替,典型的做法就是用泰勒级数展开,这种方法常称为有限差分方法;其二是对偏微分方程进行积分,当然这个积分是在将整个求解区域化为有限个单元的小单元体内进行的.为了在小单元体内积分,一种方法是在小单元体内设定变量的插值函数(或形状函数)再进行积分,这种借助于形状函数积分的方法常称为有限单元法或有限元法,本书的第四章将介绍这种方法;另一种方法是不用形状函数而是在小单元体内直接积分,这种方法常称为有限容积法,将在本书的