

水质数学模型 与应用

Models for Water and
Wastewater Treatment



杨吉祥 田 征 著

非外借



科学出版社

水质数学模型与应用

杨吉祥 田 征 著

科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书介绍了水处理领域涉及的模型,相关的模型分为水力学模型和活性污泥数值模型。书中首先介绍计算流体力学的基本理论,通过这些理论的介绍,读者可以理解并尝试利用主流的计算流体力学软件进行相关的流体计算。在此基础上,介绍针对给水处理中用到的水工设备、构筑物进行流体力学计算的案例。最后,介绍活性污泥模型的基本概念、理论及相应的建模案例。

本书可为给排水、环境工程、环境科学领域的科技人员提供计算流体力学、污水生物处理模型的基础知识,也可作为相关工程技术人员的参考书籍。

图书在版编目(CIP)数据

水质数学模型与应用 / 杨吉祥, 田征著. — 北京: 科学出版社, 2017.6
ISBN 978-7-03-052377-8

I. ①水… II. ①杨… ②田… III. ①水质模型-数学模型 IV. ①P734.4

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2017) 第 065492 号

责任编辑: 李小锐 唐 梅 / 责任校对: 韩雨舟

责任印制: 罗 科 / 封面设计: 墨创文化

科 学 出 版 社 出 版

北京东黄城根北街16号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

成都锦瑞印刷有限责任公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2017年6月第 一 版 开本: B5(720×1000)

2017年6月第一次印刷 印张: 11.75 插页: 14 页

字数: 237 千字

定价: 78.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

序

改革开放三十多年来,中国的污水处理取得了长足的进步,同时也存在许多的不足,主要表现在污水处理技术、工艺与设施的设计、施工和运行管理等存在着粗放、混乱甚至劣质的情况。相关人员严重依赖经验以及有限且极为简单的污水水质参数作粗略的评估,这与我国当前经济、社会发展的需求并不适应。

污水生物处理是生物动力学与化学工程这两个已经充分发展的学科结合的以反应和质量传递为核心的领域。例如,将实验室中的生物反应器放大之后,出现效率降低的现象,其原因很有可能是放大后的反应器内部存在质量传递方面的制约。在质量传递方面,反应器的水力条件起很大作用,因为水是各种反应物的载体。与工程流体力学不同,计算流体力学以纳维-斯托克斯等微分方程为核心,能够描述流体中各处的水流以及质量传递状态。采用人工计算这些方程式是一项艰巨的任务。相应的大型计算机软件的出现(如 CFX 和 COMSOL Multiphysics),为目标流体内部解相应的微分方程并获得各处的质量传递能力提供了现实的基础。

活性污泥法目前仍然是污水生物处理的核心技术,长期以来,其为有效处理污水中的污染物起到了关键作用。虽然活性污泥模型不能完美解释反应器中出现的各种现象,但是其作为一种有力的工具,在污水处理设施的改、扩、建等方面具有较高价值,已经在国外得到了广泛的使用。相比较而言,活性污泥模型在国内运用尚有很大空间。

《水质数学模型与应用》一书作者以近几年的研究成果为核心,介绍了计算流体力学以及活性污泥模型的原理。计算流体力学和污泥模型既可以单独用于水处理领域,也可以联合使用以对反应器进行深入地分析。第 1 章介绍了计算流体力学的基础知识;第 2 章介绍给水处理和污水处理中涉及的水力学计算案例;第 3 章介绍好氧活性污泥模型的原理和运用案例;第 4 章、第 5 章和第 6 章介绍厌氧污泥模型的相关理论和运用案例。第 7 章介绍水动力学模型和生物动力学模型相结合的一个案例。本书可以作为给排水、环境工程专业的教师、研究生和工程技术人员在应用计算流体力学和活性污泥模型时的参考书籍。

于水利
同济大学

前 言

在水处理领域，水的流动状态对水处理的效果有非常大的影响。例如，在混凝和絮凝过程中需要对速度梯度进行准确的控制以获得尺寸较大的絮体。在沉淀池中，颗粒的沉淀需要在平稳的水流中有足够的时间进行沉淀。同时，在污水处理领域，需要避免反应器中出现短流等不利的水力条件以保证反应器的运行效果。

活性污泥模型是对微生物降解污染物的表观现象进行模拟的系列微分方程。与常规采用 HRT、SRT、F/M 等参数设计和分析反应器不同的是，活性污泥模型能够用于深入地分析现有反应器的运行状态并可以有力地辅助反应器的设计。自从活性污泥模型问世以来，其在世界范围内得到了广泛的运用。活性污泥模型的运用过程一般都是将活性污泥模型与水力模型相结合的过程。水力模型一般采用若干个理想完全混合反应器以及柱塞流反应器来构建。

近年来，越来越多的学者采用计算流体力学技术(CFD)来分析以及解决水处理领域中碰到的问题。CFD 可以单独用于分析所关注对象的水力状态，也可以用于与动力学方程结合在一起分析所关注对象的物质变化。本书较系统地介绍了与 CFD 以及活性污泥模型相关的基础理论以及其运用领域。第 1 章介绍计算流体力学的基本理论，该章内容只是 CFD 整个体系中很小的一部分，但能基本满足读者初步了解 CFD 并通过相关软件完成 CFD 计算的目的。第 2 章介绍计算流体力学在水处理中水力方面的使用案例。第 3 章介绍好氧活性污泥模型的基础知识及运用案例。第 4 章和第 5 章是厌氧消化相关的理论和使用案例。由于目前厌氧颗粒污泥在厌氧污水处理领域占据领导性的地位，这两章主要围绕厌氧颗粒污泥展开。好氧污泥模型在使用中有少量的参数需要矫正。而一般情况下，厌氧消化数学模型的所有参数都需要矫正。因为，与好氧污泥模型不同的是，厌氧消化数学模型本身没有提供默认的参数而是提供了一些在文献中给出的参数范围。这给厌氧消化数学模型的使用带来了很大的困难。鉴于此，第 6 章介绍了一种采用智能算法估计厌氧消化动力学参数的例子。显然，该算法可以用于估计不同反应体系的动力学参数。第 7 章和 3.7.7 节提供了 CFD 与污泥模型相结合的例子。本书可分为四大板块。第一板块为好氧活性污泥理论基础及运用举例；第二板块为厌氧消化模型基础及运用举例；第三板块为模型参数的智能算法，该板块为第一和第二板块提供了有力的确定模型参数的手段；第四板块为计算流体力学理论基础和运用举例。通过对以上四个板块的介绍，最后提供了耦合计算流体

力学及污水处理数值模型的例子。

现有的活性污泥模型软件绝大多数都是商业化的。为了便于读者了解活性污泥模型，本书在附录中简要地介绍了采用 SIMULINK 构建活性污泥模型的方法。

本书第 1 章、2.3、2.4、3.7.2~3.7.6、5.2 和 5.3 节由杨吉祥编写，3.7.1 节由杨吉祥和田征共同撰写，其他部分由杨吉祥撰写。

本书的出版得到国家自然科学基金(51408583)和国家科技支撑计划(2015BAD13B03)的资助。作者在此表示感谢。

由于作者水平有限，书中难免有不完善之处，敬请读者批评指正。

杨吉祥

中国科学院重庆绿色智能技术研究院

目 录

第 1 章 水处理与流体力学	1
1.1 计算流体力学的一般步骤	2
1.2 控制方程	2
1.2.1 质量守恒方程	2
1.2.2 动量守恒方程	4
1.3 有限差分法	5
1.4 隐式差分方程和显式差分方程	7
1.5 有限体积法	7
1.6 湍流模型的比较	12
1.6.1 湍流模型的作用	12
1.6.2 常见两方程湍流模型	13
1.6.3 其他湍流模型	15
1.7 计算方法	16
1.7.1 压力耦合方程组的半隐式方法, 压力耦合方程组半隐式方法修正 算法, 压力的隐式算子分割算法	16
1.7.2 分步计算和耦合计算	18
第 2 章 水质工程中的水力计算	19
2.1 絮凝	19
2.1.1 机械旋转池中的絮凝	20
2.1.2 网格絮凝池	26
2.2 辐流沉淀池	29
2.2.1 一维模型	30
2.2.2 二维模型	31
2.2.3 三维模型	32
2.2.4 沉淀池模拟案例	32
2.3 消毒池优化设计中的运用	36
2.4 污水处理反应器中的水力模拟	41

2.4.1 好氧 MBR 中的水力条件	41
2.4.2 气升式环流反应器	44
2.5 膜管中的水力模拟	49
2.5.1 膜表面的质量传递	52
2.5.2 对污泥粒径的影响	53
2.5.3 强化基质在污泥上的质量传递	55
第 3 章 好氧活性污泥模型及其运用	57
3.1 反应计量学	58
3.2 反应动力学	59
3.3 反应矩阵	59
3.4 不同好氧活性污泥模型之间的差别	60
3.5 现有污水处理模型的缺陷	60
3.6 反应流程中的物质转移	61
3.7 活性污泥模型的运用	61
3.7.1 矫正污水厂活性污泥模型	62
3.7.2 入水水质的标定方法	76
3.7.3 拓展现有的模型	80
3.7.4 使用模型对现有水厂进行升级改造——强化脱氮	88
3.7.5 用模型进行替代工艺的比较——强化脱氮	90
3.7.6 模拟时间推流型反应器	95
3.7.7 活性污泥模型与 CFD 耦合技术	100
3.7.8 依据模型进行溶解氧浓度控制技术	105
第 4 章 厌氧颗粒污泥反应器模拟	112
4.1 生物颗粒模型	112
4.1.1 颗粒污泥的微生物结构	112
4.1.2 颗粒污泥中的质量传递	113
4.1.3 模拟一个颗粒污泥	114
4.2 模拟厌氧颗粒污泥反应器	116
4.2.1 水动力学模型	116
4.2.2 将厌氧消化数学模型与水动力学模型相耦合	118
4.2.3 采用神经网络模拟反应器	119
4.2.4 依赖单个代表性颗粒污泥模拟反应器	121
4.2.5 采用数值分析的方式模拟反应器	121

第 5 章 厌氧模型运用的例子 122

5.1 厌氧消化子过程稳定性分析 122

5.2 ADM1 运用于 EGSB 反应器 125

5.3 采用修正的 ADM1 模拟 UASB 128

第 6 章 复杂厌氧消化过程动力学参数的估计 135

6.1 构建算法 136

6.2 算法结果 140

第 7 章 EGSB 反应器建模 146

7.1 生化动力学 147

7.2 模型水力结构 148

7.3 控制方程 148

7.4 模型结果 150

参考文献 155

附录 1 参数表 165

附录 2 厌氧消化葡萄糖动力学方程 173

附录 3 Matlab-SIMULINK 构建污水处理组态软件 174

彩图 179

第 1 章 水处理与流体力学

当给水处理的过程中涉及颗粒物的去除时, 混凝是常用的手段。混凝过程是液体中小颗粒脱稳形成大颗粒的过程。液体中不同大小的颗粒的碰撞是小颗粒形成大颗粒的基础。颗粒的碰撞速率可由公式(1.1)表示, 即

$$N_0 = \frac{8\pi}{\sqrt{15}} \sqrt{\frac{\epsilon}{\eta}} d^3 n^2 = \frac{8}{\sqrt{15}} \pi G d^3 n^2 \quad (1.1)$$

式中, N_0 ——单位体积中的颗粒在液体中的碰撞速率, $1/(\text{cm}^3 \cdot \text{s})$;

G ——速度梯度, s^{-1} ;

d ——颗粒直径, cm ;

n ——颗粒数量浓度, $\text{个}/\text{cm}^3$;

ϵ ——湍流耗散率, m^2/s^3 ;

η ——水的运动黏度, m^2/s 。

速度梯度 G 是混凝过程主要的控制参数, 其意义是单位垂向距离上的速度增量。从公式(1.1)可以看出, 速度梯度越大, 颗粒之间碰撞的机会越多, 混凝的过程应该进行得越快。然而过大的速度梯度可以打碎已经形成的大颗粒从而不利于混凝。实践中, 混凝阶段速度梯度一般控制在 $700 \sim 1000 \text{s}^{-1}$, 而在絮凝阶段, 速度梯度一般控制在 $20 \sim 70 \text{s}^{-1}$ 。然而若在实际中采用公式(1.2), 计算得到的数值是整个设备的平均值, 而不是整个设备内部各处真实的 G 值。若采用机械搅拌, 在桨叶远端的速度梯度要远高于整个设备的平均速度梯度, 这有可能会对颗粒的絮凝造成不利的影响。

$$G = \sqrt{\frac{\epsilon}{\eta}} \quad (1.2)$$

经过絮凝得到的大颗粒在沉淀池中应该快速地沉淀以得到干净的上清液。这便需要沉淀池中的水流状态平稳, 因此, 需要较低的雷诺数和弗劳德数。此外, 管网配水、井群的计算以及消毒方面均离不开流体力学。

微生物是污水生物处理中不可或缺的成分。显然, 高微生物浓度对应高效率的反应器, 也意味着节省土地和建设成本。污水处理流程中, 后部的沉淀池起到将生物池中微生物截留在反应器中的作用。因此, 若沉淀池不能有效地发挥作用, 那么不但会导致沉淀池出水中有较高的悬浮物浓度, 也会导致生物池的低效率。这一点集中体现在厌氧颗粒污泥反应器的三项分离器上。升流式厌氧颗粒污泥反应器(UASB)的三项分离器设计较为简单, 一般由若干块横断面为 V 形的分离板组成;

而 UASB 的升级产品——膨胀床颗粒污泥反应器(EGSB)的分离器不能采用 UASB 的分离器而要经过专门的设计才能保证在反应器中更好地截留微生物。

流体力学还可以用来提高反应器的效率。通过流体力学的计算,可以发现影响反应器效率的操作参数,如反应器的结构,然后通过相应的优化可以提高反应器的效率。

污泥消化池是污水处理过程中对生化池产生大量的剩余污泥进行污泥减量的构筑物。在消化池中一般采用水力、机械等方式进行搅拌,以此来改善消化池中由于固体沉积等因素导致的有效体积减小进而造成的消化池效率降低的情况。然而我们在很长的时间内对这些搅拌方式是如何在消化池中发挥作用,以及在多大的空间内发挥作用不甚了解。而流体力学的计算结果可以给出很好的答案。

1.1 计算流体力学的一般步骤

计算流体力学主要包括以下三个步骤。

(1)建立计算区域的控制方程组。控制方程组有三个,分别是质量守恒方程、动量守恒方程和能量守恒方程。

(2)将计算区域进行网格化。例如,若计算对象是一个内部有流体流动的水管,那么就在流动区域——水管的内部划分若干个网格,从而将流体流动的区域以这些网格的组合来表示。这些网格之间通过彼此共享的网格点来连接。例如,在一个三维的计算区域内,若计算区域都用四面体网格来表示,那么每个四面体的四个顶点是该四面体与周边四个四面体进行数据交换的枢纽。

(3)将控制方程组通过泰勒级数法等方式进行离散并通过相应的计算方法解控制方程。当任意两个解之间的误差足够小时,计算结束。此时可以得到整个计算区域的数值化解。

由于水处理过程中通常水温恒定,且体积力和表面力等对流体作用引发的流体内能变化对水处理过程影响较小,因此,将计算流体力学用于水处理过程一般不涉及流体的能量守恒。

1.2 控制方程

1.2.1 质量守恒方程

质量守恒方程根据研究对象的不同有四种不同的形式,这四种不同形式的质量守恒方程之间是等价的。

1. 守恒型积分形式

在流动区域内取一个空间位置固定的有限控制体。流体进入或流出控制体将会导致该控制体内液体质量的变化。因此,进入或流出控制体的液体的质量可用表面积分的方式求出。控制体内的质量变化可由体积积分求出。守恒方程的积分形式为

$$\iint_s \rho \vec{V} \cdot d\vec{s} = - \frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho \cdot dV \quad (1.3)$$

式中, ρ ——液体密度, kg/m^3 ;

V ——控制体体积, m^3 ;

s ——控制体表面面积, m^2 ;

$\vec{V}$ ——速度矢量, m/s 。

2. 非守恒型积分形式

在流动区域内取随水流流动的空间不固定的有限控制体。该控制体内液体的质量是固定不变的。此时的质量守恒方程应为

$$\iiint_V \rho dV = 0 \quad (1.4)$$

3. 守恒微分形式

在流动区域内取一个空间位置固定的无限小微元。与守恒型积分形式的推导过程相类似,流体进入或者流出该微元引起微元内的质量变化等于微元内密度变化值乘以该微元的体积,即

$$\left[\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \right] dx dy dz = - \frac{\partial \rho}{\partial t} dx dy dz$$

即

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) &= 0 \\ \nabla &= \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \end{aligned} \quad (1.5)$$

式中, u 、 v 、 w —— x 、 y 、 z 方向上的速度, m/s ;

∇ ——散度。

4. 非守恒微分形式

在流动区域内取一个空间位置不固定的无限小微元,该微元内的质量是恒定的,因此恒有

$$m = \rho V$$

两边取微分得到

$$\frac{dm}{dt} = \frac{d\rho V}{dt} = \rho \frac{dV}{dt} + V \frac{d\rho}{dt} = 0$$

即

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \frac{1}{V} \frac{dV}{dt} = 0$$

根据 $\frac{1}{V} \frac{dV}{dt}$ 在流体力学中的意义, 得到

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \nabla \cdot \vec{V} = 0 \quad (1.6)$$

1.2.2 动量守恒方程

如图 1.1 所示, 微元上 x 方向上的表面力为

$$\begin{aligned} & \left[p - \left(p + \frac{\partial p}{\partial x} dx \right) \right] dy dz + \left[\left(\tau_{xx} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} dx \right) - \tau_{xx} \right] dy dz + \\ & \left[\left(\tau_{yx} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} dy \right) - \tau_{yx} \right] dx dz + \left[\left(\tau_{zx} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} dz \right) - \tau_{zx} \right] dx dy \end{aligned}$$

体积力在 x 方向上的分力为 $\rho f_x (dx dy dz)$ 。

二者相加为微元在 x 方向上的总力。

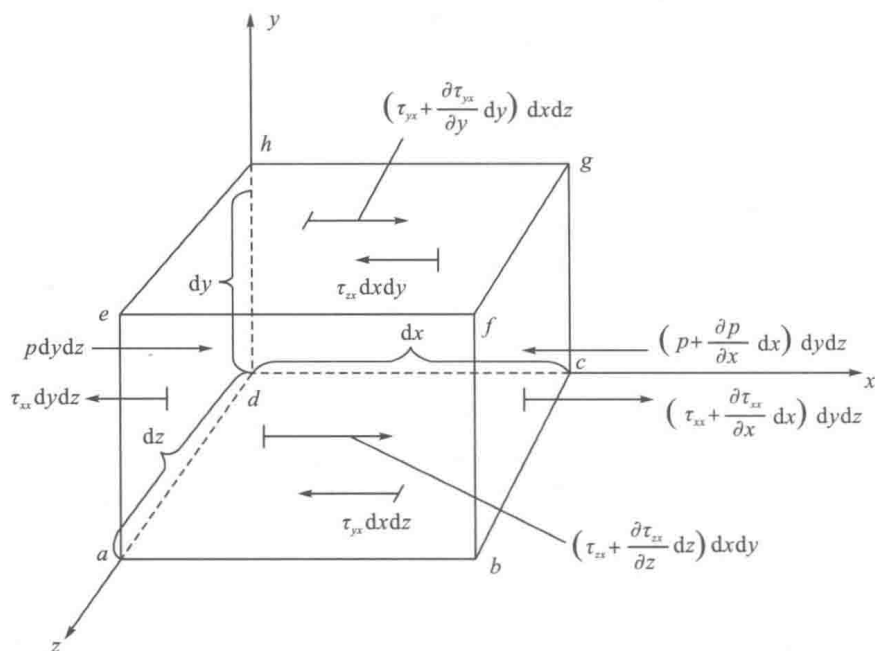


图 1.1 运动的无穷小微团

而微元的质量为

$$m = \rho dx dy dz$$

$$\text{加速度 } a_x = \frac{du}{dt}$$

由牛顿第二定律: $F = ma$, 得

$$\rho \frac{du}{dt} = -\frac{d\rho}{dt} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + \rho f_x \quad (1.7)$$

式(1.7)为非守恒形式的流体的动量守恒方程。

由于

$$\rho \frac{du}{dt} = \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \cdot \vec{V})$$

代入式(1.7), 得

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \cdot \vec{V}) &= -\frac{d\rho}{dt} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + \rho f_x \\ \tau_{xx} &= \lambda (\nabla \cdot \vec{V}) + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} \\ \tau_{xy} = \tau_{yx} &= \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \\ \tau_{xz} = \tau_{zx} &= \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\ \lambda &= -\frac{2}{3}\mu \end{aligned} \quad (1.8)$$

式(1.8)为守恒形式的流体的动量守恒方程, 也称 Navier-Stokes 方程。同理可得 Navier-Stokes 方程在 y 方向和 z 方向上的表达式。

1.3 有限差分法

如前文所述, 计算流体力学只是在计算区域内的网格点上得到计算解。计算网格点外区域的计算值由网格点上的数值通过插值得到。简单而言, 将计算范围由整个计算区域变成有限的网格点叫作离散。离散的方法有三种, 分别为有限差分法、有限体积法和有限元法。任意一种离散方法都是行之有效的方法。本节简要地叙述了有限差分法和有限体积法的原理。

由前面的内容可知, 质量守恒方程和动量守恒方程都可以用微分方程表示。而得到相应的微分方程的解析解却是困难的。有限差分法依赖于泰勒级数, 采用代数方程替代偏导数, 从而可以通过在计算区域内解若干代数方程得到微分方程的解。这种方法称为有限差分法。

如图 1.2 所示, 若采用 $u_{i,j}$ 表示速度 x 分量在 (i, j) 点的值, 那么 $u_{i+1,j}$ 可用泰勒级数表示为

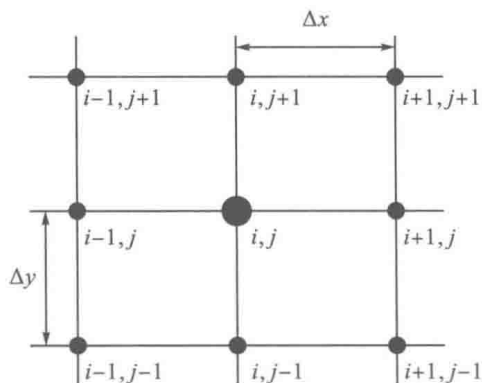


图 1.2 离散的网格点

$$u_{i+1,j} = u_{i,j} + \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} \Delta x + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{i,j} \frac{(\Delta x)^2}{2} + \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_{i,j} \frac{(\Delta x)^3}{6} + \dots \quad (1.9)$$

则

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} + o(\Delta x) \quad (1.10)$$

这样可以得到速度 u 在 x 方向上的偏导数。截断误差 $o(\Delta x)$ 表示一个截断误差是一阶的。因此这种替代一阶导数的方法称为一阶向前差分法。类似的，可以通过一阶向后差分法得到

$$u_{i-1,j} = u_{i,j} - \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} \Delta x + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{i,j} \frac{(\Delta x)^2}{2} - \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_{i,j} \frac{(\Delta x)^3}{6} + \dots \quad (1.11)$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x} + o(\Delta x) \quad (1.12)$$

结合一阶向前差分和一阶向后差分可以得到

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x} + o(\Delta x)^2 \quad (1.13)$$

式(1.13)对应的有限差分称为二阶中心差分，因为其截断误差有二阶精度。同理可以得出速度 u 在 y 方向上导数的一阶和二阶差分。

可以看出，要离散 Navier-Stokes 方程，不仅需要差分一阶导数，还需要差分二阶导数。同样结合一阶向前差分和一阶向后差分可以得到

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} + o(\Delta x)^2 \quad (1.14)$$

将式(1.9)和式(1.11)对 y 求偏导数，整理可以得到

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\right)_{i,j} = \frac{u_{i+1,j+1} - u_{i+1,j-1} + u_{i-1,j+1} - u_{i-1,j-1}}{4\Delta x \Delta y} + o[(\Delta x)^2, (\Delta y)^2] \quad (1.15)$$

式(1.15)称为混合导数的二阶精度中心差分。

不难得到 u 对 y 的二阶偏导数的差分为

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)_{i,j} = \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{(\Delta y)^2} + o(\Delta y)^2 \quad (1.16)$$

将上述偏导数的差分方程代入控制方程中之后, 控制方程可转换成差分方程。

1.4 隐式差分方程和显式差分方程

将传导方程(1.17)转化成差分方程可得到方程(1.18), 即

$$\left(\frac{\partial T}{\partial t}\right) = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (1.17)$$

$$T_i^{n+1} = T_i^n + \alpha \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n) \quad (1.18)$$

式(1.18)中节点 i 上的温度在 $n+1$ 时间上的数值 T_i^{n+1} 由 n 时间上该节点的数值 T_i^n 和前后两个节点上的数值 T_{i+1}^n, T_{i-1}^n 计算得到。由于计算 T_i^{n+1} 时, $T_i^n, T_{i+1}^n, T_{i-1}^n$ 均为已知, 因此, T_i^{n+1} 可以轻易地计算出来。这种直接的、时间推进上的、每次只求解一个未知数的计算方法称为显性算法。

若差分方程换成方程(1.19), 则未知量有 $T_i^{n+1}, T_{i+1}^{n+1}, T_{i-1}^{n+1}$ 。显然式(1.19)不能直接计算出未知数的数值, 而是需要在更多的网格上建立类似于方程(1.19)的方程, 从而用解方程组的方式把所有未知量一次性解出来。这种非直接的、时间推进上的、需要解联立方程组的方法称为隐性算法。

$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = \alpha \frac{\frac{T_{i+1}^{n+1} + T_{i+1}^n}{2} - 2\left(\frac{T_i^{n+1} + T_i^n}{2}\right) + \frac{T_{i-1}^{n+1} + T_{i-1}^n}{2}}{(\Delta x)^2} \quad (1.19)$$

两种方法孰优孰劣难以区分, 主要还是根据不同的计算对象来选择不同的方法。显性算法运用中每次推进的时间步长要足够小才能保持计算的稳定; 而隐性算法的时间步长范围可以高于显性算法。因此, 若计算案例为定常流动, 采用隐性算法需要的计算时间可能要少于采用显性算法。若计算案例为非定常流动, 那么采用对时间步长要求低的隐性算法可能不能给出精确解。

1.5 有限体积法

从有限差分法可以看出, 利用任一节点附近节点处的数值可以将该节点处的微分方程转化成为代数方程并经过后续迭代求解从而获得该节点处的数值。有限体积法与有限差分法类似, 都是利用附近计算单元的数值通过求解代数方程的方式来获得本计算单元的数值。二者不同之处在于有限差分法的计算对象为节点, 而有限体积法的计算对象为包含一个节点的相互之间不重叠但是有共同面的有限

体积。有限体积法得出的离散方程,要求因变量的积分守恒对任意一组控制体积都得到满足,对整个计算区域,自然也得到满足。而这与采用的网格类型并无太大关系。使用有限体积法时应该采用适当的差值方法获得控制体之间的面上的数值,同时网格也需要足够的精细才能得到精确的解。有限体积法是目前比有限差分法运用更为广泛的方法。其原理概述如下。

若要计算图 1.3 所示 P 点的数值,在计算区域内取若干个控制体积,每个控制体积内包括一个节点。这些节点相互交界但是不重叠,所有的控制体积构成了整个计算区域。

在计算区域内求解下面的质量传递方程

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(u_i c) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D \frac{\partial c}{\partial x_i} \right) + S \quad (1.20)$$

式中, c ——浓度;

D ——扩散系数;

S ——源项。

稳态条件下, P 点处控制体的质量平衡方程用式(1.21)表示(图 1.4)。

$$\begin{aligned} & A_e u_e c_e - A_w u_w c_w + A_n u_n c_n - A_s u_s c_s \\ & = DA_e \left. \frac{dc}{dx} \right|_e - DA_w \left. \frac{dc}{dx} \right|_w + DA_n \left. \frac{dc}{dx} \right|_n - DA_s \left. \frac{dc}{dx} \right|_s + S_P \end{aligned} \quad (1.21)$$

式中, A_w 、 A_n 、 A_e 、 A_s ——面的面积;

c_w 、 c_n 、 c_e 、 c_s ——面上的浓度;

c_w 、 c_n 、 c_e 、 c_s ——单元中心的浓度;

u_w 、 u_n 、 u_e 、 u_s 、 v_w 、 v_n 、 v_e 、 v_s ——面上的速度;

u_w 、 u_n 、 u_e 、 u_s 、 v_w 、 v_n 、 v_e 、 v_s ——单元中心的速度;

S_P ——单元 P 的源。

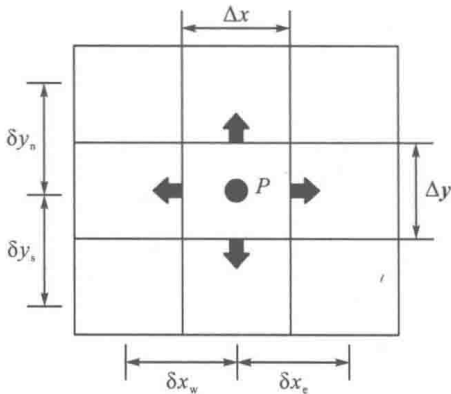


图 1.3 控制体示意图

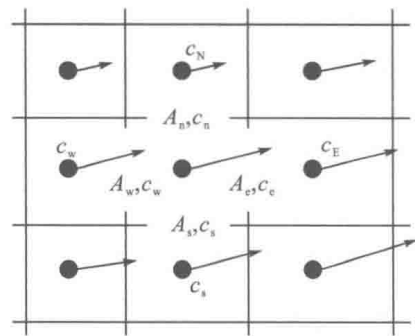


图 1.4 基于控制体的离散

求解方程(1.21)需要知道控制体四个面(e, w, n, s)上的数值。采用一阶迎风格式获取控制体四个面上的数值,每个面上的数值取为该面前端节点的数值。