



“十三五”普通高等教育规划教材

热物理过程数值模拟

冉景煜 主 编
李隆键 副主编
王秋旺 主 审



中国电力出版社
CHINA ELECTRIC POWER PRESS

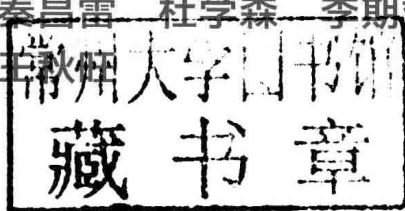
非 外 借



“十三五”普通高等教育规划教材

热物理过程数值模拟

主 编 冉景煜
副主编 李隆键
参 编 杨仲卿 廖 全 丁 林 闫云飞
秦昌雷 杜学森 李期斌
主 审 常州大学图书馆



中国电力出版社
CHINA ELECTRIC POWER PRESS

内 容 提 要

本书为“十三五”普通高等教育规划教材。

本书系统地反映了开展热物理过程数值模拟应具备的基础知识, 主要内容包括热物理问题的数学描述及模拟基本步骤、区域离散化方法、建立离散方程的方法、离散方程的特性分析、宏观热物理问题数值计算中基本问题的处理方法、对流扩散方程的差分格式、二维流动与换热问题数值计算、燃烧问题数值计算、微纳尺度热物理问题 MD 和 LBM 数值模拟方法, 以及部分常用数值模拟软件等。

该书紧密结合数值模拟手段的发展, 充分反映热物理问题数值模拟方法发展的新趋势和动向, 力求使读者获得适应 21 世纪能源动力学科和产业发展需求的知识和能力。

本书可作为高等院校动力工程及工程热物理专业研究生教材 (32 学时), 也可作为高年级本科生相关专业教材, 或供化工、航空航天等其他相关行业人员参考。

图书在版编目 (CIP) 数据

热物理过程数值模拟/冉景煜主编. —北京: 中国电力出版社, 2018. 2

“十三五”普通高等教育规划教材

ISBN 978-7-5198-1649-0

I. ①热… II. ①冉… III. ①工程热物理学—高等学校—教材 IV. ①TK121

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2017) 第 328973 号

出版发行: 中国电力出版社

地 址: 北京市东城区北京站西街 19 号 (邮政编码 100005)

网 址: <http://www.cepp.sgcc.com.cn>

责任编辑: 吴玉贤 (010-63412540)

责任校对: 马 宁

装帧设计: 左 铭

责任印制: 吴 迪

印 刷: 北京雁林吉兆印刷有限公司印刷

版 次: 2018 年 2 月第一版

印 次: 2018 年 2 月北京第一次印刷

开 本: 787 毫米×1092 毫米 16 开本

印 张: 10.75

字 数: 261 千字

定 价: 35.00 元

版 权 专 有 侵 权 必 究

本书如有印装质量问题, 我社发行部负责退换

前 言

热物理过程普遍存在于能源开发与利用过程中的各个环节，在所有热物理过程中，几乎都涉及流动、传热、燃烧问题。随着计算机硬件及软件技术的飞速发展，对热物理过程进行数值模拟是动力工程及工程热物理学越来越重要的手段，也越来越被更多的科技人员学习、掌握和应用，已成为当前应用最广的方法。

编写组综合长期课程教学工作和指导实践性环节的经验，结合国内外该领域最新研究成果，将自己的教学体会融合到内容中，编成本教材。

本书强调物理的概念和方法，而不过分倚重纯数学的推导，以一维为基础，扩展到二维、三维；在内容的选择上注意动力工程及工程热物理学研究生的特点，适合工程类学生教学内容深度，由简到繁，由浅入深，使学生易于掌握和运用；同时注重进行热物理过程数值计算的方法与实际数值计算问题能力的培养，而不过于追求理论体系的完整，培养学生学以致用、理论联系实际的能力和素养。

本书由重庆大学冉景煜教授担任主编并统稿。第一、二章由冉景煜编写；第三、五章由杨仲卿编写；第四章由秦昌雷编写；第六章由丁林编写；第七、八章由李隆键、廖全编写；第九章由闫云飞编写；第十章由李期斌编写；第十一章由杜学森、闫云飞编写。

本书由西安交通大学王秋旺教授主审。王秋旺教授在百忙中详细审阅了全部书稿，提出了许多宝贵的意见和建议，使编者在修改过程中受益匪浅，在此表示诚挚的感谢。

由于编者水平所限，加之时间仓促，书中疏漏和不足之处在所难免，恳请读者批评指正。

编 者
2018.1

目 录

前言

第一章 概论	1
第一节 热物理问题的研究方法	1
第二节 研究方法的比较与选择	2
第三节 湍流脉动数值模拟方法 (DNS、RANS、LES)	3
第二章 热物理问题的数学描述及模拟基本步骤	5
第一节 坐标及性质	5
第二节 控制微分方程	6
第四节 控制方程的类型	9
第五节 热物理问题数值计算的基本步骤	10
第三章 区域离散化方法	13
第一节 基本概念	13
第二节 内节点法与外节点法	13
第三节 网格系统的标记方法	14
第四节 两种区域离散化方法的比较	15
第五节 网格的生成技术	16
第四章 建立离散方程的方法	21
第一节 一维模型方程	21
第二节 泰勒级数展开法	21
第三节 多项式拟合法	24
第四节 控制容积积分法	26
第五节 控制容积平衡法	30
第六节 建立离散方程方法的比较	31
第五章 离散方程的特性分析	33
第一节 离散方程的数学特性	33
第二节 离散方程的物理特性	41
第三节 建立离散方程的基本法则	46
第六章 宏观热物理问题数值计算中基本问题的处理方法	50
第一节 概述	50
第二节 离散方程的建立	52
第三节 网格处理	57
第四节 界面导热系数	58

第五节	源项线性化	59
第六节	边界条件处理	62
第七节	线性方程组的求解	69
第七章	对流扩散方程的差分格式	78
第一节	对流与扩散	78
第二节	中心差分与迎风差分	79
第三节	指数格式、混合格式与乘方格式	81
第四节	界面通量计算的一般形式	86
第五节	多维问题的离散化方程	89
第六节	假扩散	91
第八章	二维流动与换热问题数值计算	96
第一节	控制方程及求解的困难	96
第二节	交错网格及动量方程的离散	98
第三节	求解 Navier - Stokes 方程的压力修正算法	100
第四节	SIMPLE 算法讨论	102
第九章	燃烧问题数值计算	109
第一节	燃烧问题数值计算的燃烧模型	109
第二节	燃烧问题数值计算关键问题的处理方法	116
第十章	微纳尺度热物理问题 MD 和 LBM 数值模拟方法	128
第一节	分子动力学模拟方法	128
第二节	格子玻尔兹曼方法	134
第十一章	热物理问题数值模拟软件	140
第一节	CFD 模拟软件	140
第二节	化学动力学模拟软件	146
参考文献		165

第一章 概 论

流动、传热、燃烧问题是能源动力类各专业和机械类机械工程专业所研究和解决的主要问题之一，燃烧问题实际上是有化学反应的流动与传热问题，推而广之，在所有热物理过程中，几乎都涉及流动、传热问题。在热物理过程中，进行必要预测是非常重要的，如在规定设计参数的相应的结构下，要预测热物理过程是否满足要求、达到预定的指标；进行热物理过程优化设计、不同方案的比较，同样需要预测。通过必要的预测，可减少设计、生产、再设计和再生产的费用，减少设计更改、减少试验和测量次数。

热物理过程预测问题的核心主要包括速度场、温度场（传热量）、浓度场的获取等。

第一节 热物理问题的研究方法

热物理问题主要的研究方法包括理论分析法、实验测定、数值模拟。

一、理论分析法

以数学分析为基础，求解描述热物理过程的定解问题，获得函数形式的解，表示求解区域内物理量连续分布的场（速度场、温度场、浓度场……），即可通过控制方程与单值条件（数学模型）获得理论解（分析解、解析解）。

根据解的准确程度，理论分析法又可再分为：①精确分析解（严格解）。其特点为函数形式的解，它在求解区域精确地满足定解问题；其具体解法有直接积分法、分离变量法、积分变换法、热源法、映射法。②近似分析解法。其特点为函数形式的解，在求解区域上近似地满足定解问题（但在总量上满足相应的守恒原理，即动量守恒、能量守恒、质量守恒）。其具体解法有积分法（从积分方程出发）、变分近似解法、摄动法（从微分方程出发）等。

二、实验测定

（1）纯实验法。搭建 1:1 的实验台架，进行实验研究。

（2）相似理论实验法。同类相似，可减少变量数目，进而减少工作量，得到规律性的结果，可直接应用。

（3）实验类比法。异类相似，即物理现象不同；规律相同，即微分方程形式相同，单值性条件类似。如电热类比、水热类比等。

三、数值模拟

以数值计算方法为基础，利用电子计算机求解物理过程的方法——热物理过程的数值模拟。用计算机对热物理问题进行数值计算就像在实验室中对该现象进行实验测定一样，可称之为“数值实验”。随着高速、大容量计算机的发展，以及普及和推广，这种数值实验的方法越来越被更多的科技人员掌握和应用，成为解决热物理过程的一种重要方法。

第二节 研究方法的比较与选择

一、分析解法

分析解法的优点：①精确预测了数学模型所控制的热物理过程；②函数形式的解使得可以确定区域中任意位置物理量的大小；③以显函数的形式，展示各有关参量对该热物理过程的影响；④由于是函数形式的解，便于进一步的运算、处理，例如求导、积分。

缺点：①获得分析解的可能较小；②即使能求得分析解，也常常是无穷级数，特殊函数以及涉及特征值问题的超越函数，要得到具体的数值结果，也需要复杂的计算；③数学模型的结果也需要有实验检验。

二、实验方法

实验方法的优点：①可以获得热物理过程可靠的数据资料；②全比例设备实验可预测由它完全复制的同类设备在相同条件下将如何运行和变化；③是研究一种新的基本现象的唯一方法；④是检验其他研究方法准确程度的标准。

缺点：①全比例实验代价大（投资、物力、人力、周期等）；②缩小比例模型实验，可能导致结果的外推受准则数实验范围的限制，有些在全比例设备上才能出现的特征在缩小比例模型上并非总是能模拟（例如流动的涡），降低了模型实验的效果；③测试困难并存在测量误差；④有些过程无法预先进行试验，如航天、气象预报等。

三、数值模拟

数值模拟优点：①成本低。在大多数实际应用中，计算机运算的成本要比相应的实验研究成本低好几个数量级，对象越庞大，过程越复杂，此优点就越突出；同时，与大多数物品价格不断上涨的趋势相反，计算成本还会降低。②速度快、周期短。可进行不同方案的对比计算和优选，这对某些大型实验几乎是不可能的。③信息完整。能提供计算区域内所有位置上有关变量的值（速度、压力、温度、浓度等），而实验则不可能测出整个区域各点处所有变量的值。④具有模拟真实条件的能力。几何条件、边界条件、物性条件、初始条件等，很容易模拟真实条件，不需要采用缩小模型或冷态实验，无论大小、高低温、过程快慢。⑤具有模拟理想条件的能力。对于研究物理现象而不是工程问题时，注意力集中于几个基本参数而要设法消除所有无关的因素。如几何条件（维数变化，尺寸 $\rightarrow\infty$ ），物性（常密度），边界条件（如绝热表面），初始条件（如特定的初始温度分布）等。

缺点：①数值模拟的对象是数学模型，经简化处理获得的计算结果准确性有待检验。②对一些十分复杂的问题（几何形状复杂，强烈非线性、物性变化大），数值解可能很难获得，或者即便可以获得，代价也是相当昂贵的，例如，对湍流问题，要想通过求解非稳态 N-S 方程来算出它们的全部与时间相关的结果，则仍然是计算所不能及的。③对解的唯一判断力较弱。

为了进一步讨论数值模拟的缺点，可以把所有的实际问题分成两大类：

A 类：有完整数学模型的一类问题，如热传导、层流问题、简单的湍流边界层问题。对这类问题，用计算机求解的优越性远远大于实验研究，有数值模拟缺点的②、③两条；在某些情况下也需要进行实验检验。对于此类问题，研究计算方法的目的在于使这些计算方法更加可靠、准确和有效。随着研究的进展，其缺点将被不断被克服。

B类：迄今无完整数学模型的一类问题，如复杂湍流、某些非牛顿流体、某些两相流动等，问题的分类还存在标准问题，即描述到什么样的程度可以认为是“够了”“合适”的。A类的缺点B类全有。此外，必须进行实验检验。

数学模型的研究不断地把B类问题转化为A类：试算与修正。先提出一个模型，进行计算求解，再与实验结果进行比较，进而修正模型，并不断完善。湍流模型的最新发展就是这种转换的一个典型例子， $k-\epsilon$ 双方程模型最初建立在科尔莫戈洛夫 (Kolmogorov, 1942 年) 及普朗特 (Prandtl, 1945 年) 的工作基础上的，但并未也不可能付诸实现，只有到了 20 世纪 70 年代，当计算机和计算方法变得更加强的时候，该模型才逐步趋于完整并付诸实际应用。

四、方法的选择

理论分析法、实验测定、数值模拟三种方法相辅相成，互为补充。分析解可以为检验数值模拟结果的准确度提供比较依据，常常用有分析解的简单问题检验方法的准确度；简单的解析解可以为发展数值方法中的某些算法提供理论依据，如采用调和平均计算导热系数 λ ；物理规律、数学模型的正确建立必须通过对现象的充分观察和测定，出现在数学模型中的物性参数只有通过实验测定才能获得，如 $q = -\lambda \partial t / \partial n$ 中的导热系数 λ 等。

数值模拟的对象是热物理过程的数学模型，所以其结果的准确度首先取决于数学模型反映实际热物理过程的准确度（包括所用的特性参数），然后才是所采用的数值方法，计算机并不能创造信息、发现规律，它只能把人们所输入的信息，按照计算者安排的程式对信息进行加工、处理，从而得到相应的结果。但是，一旦确立了与实际物理过程相符合的物理模型、数学模型，数值模拟又可以发挥很大的作用，它可以减少实验工作量，拓宽实验研究的范围，实现对理想单值性条件的模拟；对那些耗资巨大、条件恶劣的实验，或者难以进行的实验来说，“数值实验”更是一种有吸引力的辅助或替代手段。

理论分析、实验测定和数值模拟有机而协调地结合，是研究热物理过程理想而有效的方法。

第三节 湍流脉动数值模拟方法 (DNS、RANS、LES)

在工程应用中，湍流流动几乎是普遍存在的现象，湍流流动是一种非常复杂的流动，通常实验方法研究分析其特征及规律相对较难测定。数值模拟是研究湍流的主要手段，现有的湍流脉动数值模拟的方法有三种：直接数值模拟 (direct numerical simulation, DNS)、雷诺平均模拟 (Reynolds average Navier - Stokes, RANS) 和湍流大涡数值模拟 (large eddy simulation, LES)。

直接数值模拟 (DNS) 就是不用任何湍流模型，直接求解完整的三维非定常的 N - S 方程组，计算包括脉动在内的湍流所有瞬时运动量在三维流场中的时间演变。目前只限于较小 Re 数的湍流，其结果可以用来探索湍流的一些基本物理机理，可以获得湍流场的精确信息，是研究湍流机理的有效手段，但现有的计算资源往往难以满足对高雷诺数流动模拟的需要，从而限制了它的应用范围。

雷诺平均模拟 (RANS) 即应用湍流统计理论，将非稳态的 N - S 方程对时间作平均，求解工程中需要的时均量。湍流模式理论是依据湍流的理论知识、实验数据或直接数值模拟

结果,对 Reynolds 应力做出各种假设,即假设各种经验的和半经验的本构关系,从而使湍流的平均 Reynolds 方程封闭。

直接数值模拟和雷诺平均模拟可以计算高雷诺数的复杂流动,但给出的是平均运动结果,不能反映流场紊动的细节信息。

湍流大涡数值模拟 (LES) 是有别于直接数值模拟和雷诺平均模拟的一种数值模拟手段。利用次网格尺度模型模拟小尺度紊流运动对大尺度紊流运动的影响即直接数值模拟大尺度紊流运动,将 N-S 方程在一个小空间域内进行平均 (或称之为滤波),以使从流场中去掉小尺度涡,导出大涡所满足的方程。LES 把包括脉动运动在内的湍流瞬时运动量通过某种滤波方法分解成大尺度运动和小尺度运动两部分。大尺度要通过数值求解运动微分方程直接计算出来,小尺度运动对大尺度运动的影响将在运动方程中表现为类似于雷诺应力一样的应力项,该应力称为亚格子雷诺应力,它们将通过建立模型来模拟。

LES、DNS、RANS 三种模拟模型中 DNS 的计算量最大,LES 的计算量介于另外两者之间,RANS 的计算量最小。影响计算量的因素有三个:网格数量、流场的时间积分长度 (与计算时间长度有关) 和最小旋涡的时间积分长度 (与时间步长有关),其中网格数量是重要因素。

习 题



- 1-1 请简要分析热物理过程问题的研究方法,并分析其异同。
- 1-2 简述 DNS、RANS、LES 湍流脉动数值模拟方法的特点。

第二章 热物理问题的数学描述及模拟基本步骤

第一节 坐标及性质

一、坐标的性质

坐标(系)与自变量是相互关联的。坐标(系)或自变量的数目对问题的难易程度有很大影响,而对一定的问题而言,坐标(自变量)数目是可变的,既可以用这个坐标系来描述,又可以用别的坐标系来描述。

1. 自变量的作用

$t=t(x, y, z, \tau)$ 或 $\phi=\phi(x, y, z, \tau)$, 如图 2-1 所示。

(1) 数值计算中,将选择用来计算 ϕ 值的自变量值,所需计算 ϕ 值的位置的多少与自变量的数目有关,自变量数目增加,所需计算 ϕ 的位置数也会上升。

(2) 因变量与自变量的相对性。为求解方便,因变量和自变量是可以相互转换的。如 $t=t(x, y, z, \tau) \Rightarrow z=z(x, y, \tau, t)$, 适用于温度场为坐标的单调函数的情形。

2. 坐标的选择原则

坐标的选择原则应恰当。应选择自变量数目最少的坐标系,从而可使得网格节点数少,可减少计算工作量。遵循的原则主要有四种。

(1) 应选择最简单的坐标系。如从直角坐标系变为圆柱坐标系时,圆柱中的轴对称导热: $t(x, y) \Rightarrow t(r)$, 圆管内的轴对称流动: $\phi(x, y, z) \Rightarrow t(r, z)$ 等。

(2) 利用准稳态的概念,建立运动坐标系,可减少自变量个数,如图 2-2 (a) 所示。

$$\phi(x, y, z, \tau) \Rightarrow \phi(x', y', z')$$

(3) 利用充分发展的概念。如存在这样一个坐标,当过程发展到一定深度后,因变量的无量纲分布与该坐标无关,即如 $t=t(x, y)$, 充分发展后,则有 $\theta = \frac{t-t_2}{t_b-t_w} = \theta(y)$, $t_b=t_b(x)$ 。

又如平面自由射流: $u=u(x, y)$, $\bar{u} \equiv u/u_c$, $\eta=y/\delta$, $u_c=u_c(x)$, $\delta=\delta(x)$, 但 $\bar{u}=\bar{u}(\eta)$, 如图 2-2 (b) 所示。

(4) 相似变换:减少自变量数目的变换统称相似变换。如半无限大物体 ($x \geq 0$) 在第一类边界条件 (1B.C.) 下的非稳态导热: $t(x, y) \Rightarrow t(\eta)$, $\eta=cx/\sqrt{\tau}$ 。

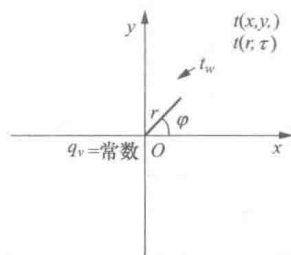


图 2-1 直角坐标系

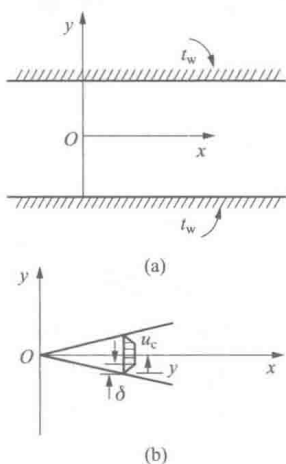


图 2-2 运动坐标系

3. 坐标的单、双向性

采用单向坐标和双向坐标的概念,可以形象地描绘不同类型控制方程的物理作用上的区别。

(1) 单向坐标。在一个坐标轴上, 如果扰动 (或影响) 只能向一个方向传递, 则称此坐标为单向坐标, 如图 2-3 所示。

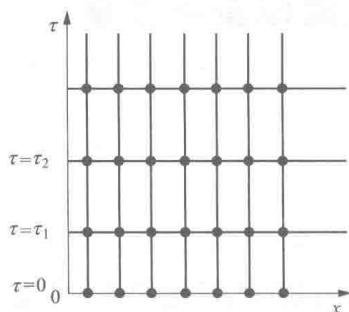


图 2-3 单向坐标 (一)

何谓向一个方向传递? 坐标上任意给定位置处因变量之值只受该位置一侧条件变化的影响, 且该点因变量之值也只对其一侧位置上的因变量值发生影响。如 (“抛物形”表示一种 “单向作用” 的概念) 时间坐标是一个典型的单向坐标; 又如高温固体冷却时, 它在某瞬时的温度只受该时刻以前的条件的影响。

(2) 双向坐标。在一个坐标轴上扰动 (或影响) 可以向两侧传递, 称为双向坐标。何谓向两侧传递? 坐标上任意给定位置处因变量之值要受该位置两侧条件变化的影响, 且该处因变量之值也会对其两侧位置上的因变量值发生影响。空间坐标是典型的双向坐标。

但在一定条件下, 空间坐标也可以成为单向坐标。如在流体流动时, 如果在某一个坐标上有很强的单向流动, 则重要的影响只能从上游传播到下游, 某处状态也主要受其上游条件的影响, 受下游条件影响很小, 如图 2-4 所示。

对流是一种单向过程, 而扩散是一种双向过程: 在流体流动时, 二者同时存在, 仅当对流作用很强 (流量很大) 时, 扩散作用可忽略不计, 空间坐标才近似成为单向坐标。

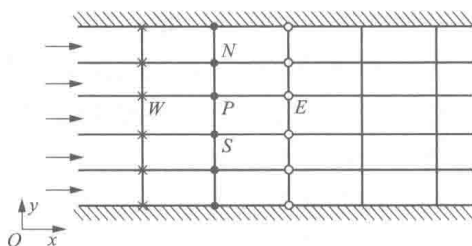


图 2-4 单向坐标 (二)

第二节 控制微分方程

热物理过程中的流动十分复杂, 但它仍然遵循连续介质的一般动力学定律, 即质量守恒定律、动量守恒定律和能量守恒定律。

一、连续性方程

连续性方程是质量守恒定律在流体力学中的具体数学表达, 也称为质量守恒方程。连续性方程可以表示成微分的形式, 也可以表示成积分的形式。

质量守恒定律源于物质不灭论, 其基本含义是, 物质不能够凭空产生或者消失, 因此其质量始终是守恒的。下面介绍在微小控制体上运用质量守恒定律建立微分形式的连续性方程。

在图 2-5 的坐标系中取微小的平行六面体控制体, 边长 Δx 、 Δy 、 Δz 为小量, 其形心位于点 M 。假设在点 M 流体的速度和密度分别为 (u, v, w) 和 ρ , 于是, 根据质量守恒, 单位时间内控制体中流体质量的增量就等于通过所有控制面净流入的质量流量, 得到

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \Delta x \Delta y \Delta z = - \left[\frac{\partial (\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial (\rho w)}{\partial z} \right] \Delta x \Delta y \Delta z \quad (2-1)$$

化简式 (2-1) 可得

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial (\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (2-2)$$

式(2-2)即为达朗贝尔在18世纪中期首先建立的连续性方程。等号左边后三项之和是单位时间内净流出单位体积控制体的质量流量。写成张量形式即为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho v_i) = 0 \quad (2-3)$$

对于均质不可压缩流体,其密度为常数,因此上式可以简化为

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (2-4)$$

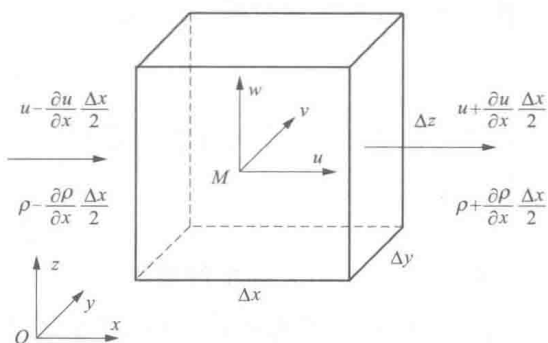


图 2-5 控制体示意

二、动量方程

张量形式的表达式为

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho v_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j v_i) = -\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + S_i \quad (2-5)$$

其中

$$\sigma_{ij} = p\delta_{ij} - \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \mu \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \delta_{ij} \quad (2-6)$$

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j \end{cases} \quad (2-7)$$

式中: S_i 为体积力和阻力在 i 方向的分量。

动量方程式(2-5)表示单位体积的 i 方向动量的增加率等于 i 方向动量进入此单位体积的净流率加上作用于该单位体积的净体积力。

三、能量方程

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \tilde{H} - p) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho v_i \tilde{H}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_h \frac{\partial \tilde{H}}{\partial x_i} + \sum \Gamma_a Q_a \frac{\partial m_a}{\partial x_i} \right) + Q_h$$

$$H = h + p/\rho, \quad \tilde{H} = H + \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}/2 \quad (2-8)$$

式中: $\tilde{H}$ 为包括动能的总焓; Γ_h 为热交换系数; Q_a 为化学组分 a 的反应热; Q_h 为包括剪切功流入的净速率和反应所产生和吸收的热能、辐射能、电能等; H 为滞止焓; h 为焓。

Γ_h 的定义为

$$\Gamma_h = \lambda/c_p \quad (2-9)$$

式中: c_p 为比定压热容。

式(2-8)表示,热力学能和动能之和的增加率等于滞止焓以对流与扩散两种方式流入单位体积内的净速率和源项 Q_h 之和。

化学反应会引起化学组分产生变化并使气体的状态发生变化,因此存在化学的计算过程需要引入下面的化学组分方程及状态方程。

四、化学组分方程

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho m_a) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho v_i m_a) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_a \frac{\partial m_a}{\partial x_i} \right) + R_a \quad (2-10)$$

式中: R_a 为包括化学反应引起的产生(或消耗)率以及颗粒反应产生的质量源。

化学组分 α 的质量分数 m_α 的定义式为

$$m_\alpha = \frac{\rho_\alpha}{\rho} \quad (2-11)$$

式中: Γ_α 为化学组分 α 的质量扩散系数。

Γ_α 的定义式为

$$\Gamma_\alpha = \rho D_\alpha \quad (2-12)$$

式中: D_α 为化学组分 α 的扩散系数。

式 (2-12) 表示化学组分 α 的质量增加率等于组分 α 进入单位体积的净流率加上单位体积中由于化学反应引起的产生 (或消耗) 率。

五、湍流的时间平均方程

湍流为给定点处的物理量随时间而变化, 具有随机性。

工程上关心的是运动状态的时间平均特性, 即非稳定层流方程的时间平均方程、湍流流动的时间平均方程。假设湍流中存在相对于时均值的脉动, 平均化 (时均化) 运算存在附加项, 比如雷诺应力 (湍流热流)、湍流扩散流量密度 (湍流模型) 等用平均性质来表示的附加项。

可引入湍流黏度 (湍流扩散系数) $\rightarrow$ 滞流应力, 流量必度 $\rightarrow$ 时均方程—层流方程, 相应的层流交换系数用有效系数代替。熟知的 $k-\epsilon$ 模型为

$$\frac{\partial}{\partial \tau}(\rho k) + \text{div}(\rho \vec{w} k) = \text{div}(\Gamma_k \nabla k) + G - \rho \epsilon \quad (2-13)$$

六、通用方程

通用方程可以有量纲形式, 也可以是无量纲形式, Γ 、 S 也可相应无量纲化。

1. 向量形式

$$\frac{\partial}{\partial \tau}(\rho \phi) + \text{div}(\rho \vec{w} \phi) = \text{div}(\Gamma \nabla \phi) + S \quad (2-14)$$

对于不同的 ϕ , 有特定的 Γ 、 S 与之之间相对应。大多数的传递过程中, 扩散流量密度 J_d 由变量 ϕ 的梯度确定, 即 $J_d = -\Gamma \nabla \phi$ 。也有扩散流量密度不由 ϕ 梯度支配的情形, 这时可将 J_d 并入 S 中。由连续性方程: $\frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \text{div}(\rho \vec{w}) = 0$ 可推出 $\phi=1$, $\Gamma=0$, $S=0$ 。

2. 直角张量形式

$$\frac{\partial}{\partial \tau}(\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \phi) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_j}) + S \quad (2-15)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) = 0 \quad (2-16)$$

和法则: 若在同一项中出现两下标相同, 则表示要对该下标从 1~3 求和。

把特定的控制微分方程改写成通用形式的方法: ①把相关因变量的非稳态项、对流项及扩散项转化成标准形式; ②把扩散项内 ϕ 梯度前的系数取为 Γ 的表达式; ③把其余所有项之和置于方程右端, 定义为源项。

七、状态方程

$$\rho = \rho(p, T) \quad (2-17)$$

对于理想气体, 当温度变化范围不大时, 有

$$p = \rho RT \quad (2-18)$$

式中： R 为理想气体常数。

第四节 控制方程的类型

一、基于数学特性的控制方程类型

1. 定义

限于二阶偏微分方程，对二元二阶线性偏微分方程 $\phi(x, y)$ ，存在 $a\phi_{xx} + b\phi_{xy} + c\phi_{yy} + d\phi_x + e\phi_y + f\phi = g(x, y)$ ，这里下标 xy 表示 ϕ 对该变量的导数， $\phi_x = \partial\phi/\partial x$ ， $\phi_{xx} = \partial^2\phi/\partial x^2$ ， $\phi_y = \partial\phi/\partial y$ ， $\phi_{yy} = \partial^2\phi/\partial y^2$ ， $\phi_{xy} = \partial^2\phi/\partial x\partial y$ ， a 、 b 、 c 、 d 、 e 、 f 、是 x 、 y 的函数，对求解区域 R ，方程的特性由系数 $b^2 - 4ac$ 的值决定，即

$b^2 - 4ac > 0$ 时，在区域内任意一点有两条实的特征线，为双曲形方程；

$b^2 - 4ac = 0$ 时，在区域内任意一点有一条实的特征线，为抛物形方程；

$b^2 - 4ac < 0$ 时，在区域内任意一点无实的特征线，为椭圆形方程。

2. 三类方程在数学上的主要区别

影响区域和依赖区域不相同。

依赖区域为 R 中任一点 P 的依赖区域。为了唯一确定 $\phi(P)$ ，必须给出函数 ϕ 值的点 B 依赖区域的集合。影响区域为 P 的影响区域。即 $\phi(P)$ 变化时，函数 ϕ 值发生变化的点的集合，如图 2-6 所示。

3. 三类方程的特性

(1) 椭圆形方程（即求解区域上每一点都是椭圆形的）：对于能量方程，无非稳态项，自变量与时间无关。

特点：无特征线，任一点 P 的依赖区域是包围该点的区域封闭边界曲线，而 P 点的影响区域则是整个求解区域。

● 边值问题，对应于物理学上的一类平衡问题或稳态问题。

● 求解区域内各点处的因变量值是相互影响的，与双向坐标相联系。

结果：离散代数方程必须联立求解（直接解法或迭代解法），而不可能把区域中某一部分的值求得后再去确定其区域上的值。

(2) 抛物形方程：因变量与时间有关或问题中存在类似于时间的自变量，与单向坐标相联系，能量方程中有非稳态项。

对应于物理学上类非平衡问题或非稳态问题、步进问题。

特点：过区域中任一点 P 有一条实特征线，其方向与单向坐标相垂直，如图 2-7 中 P 点的依赖区域和影响区域以特征线为分界线。

对非稳态问题：某一瞬间物体中的温度（分布）取决于该瞬时以前的情况及边界条件，而与该瞬时以后将要发生的情况无关；反之，某一时刻的温度只影响此后的温度分布。

边界层类型的流动与换热：忽略主流方向的扩散作用，下游的物理量（ u ， v ， $t \dots$ ）取决于上游，上游只会影响下游的物理量。

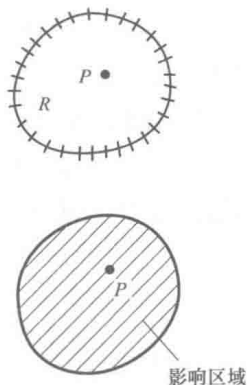


图 2-6 影响区域示意

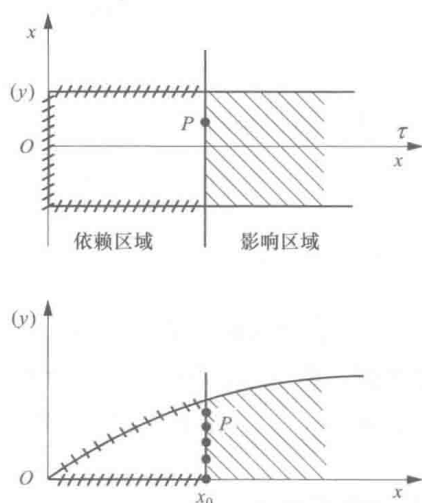


图 2-7 区域划分 (一)

结果：不必将单向坐标上所有位置处的离散方程联立求解！只需从某一初始值出发，结合边界条件，沿单向坐标一步步向前推进，步进法→步进问题。可大量节省计算机的内存及计算时间，二维→存储一维，三维→存储二维。

(3) 双曲形方程：依赖和影响区域与抛物形方程相同，即依赖区域位于运动方向的上游，影响区域位于下游。

不同之处：某点的依赖区域或影响区域，不是其上游或下游区域的全部，而只是过该点的两条特征线之间的区域，如图 2-8 所示。例如无黏流体的非稳态流动和无黏流体的稳态超声速流动。

大多数工程导热、对流换热问题都属于椭圆形或抛物形方程，本课程只限于讨论这两类方程。

二、物理特性与控制方程类型

在传热学中对应于椭圆形与抛物形方程的物理过程有专门的称谓。

抛物形：有一个空间坐标是单向坐标，即边界层型（流动或换热）问题。

椭圆形：所有空间坐标都是双向的，即回流型问题。

三、守恒型与非守恒型方程

控制方程可以分成守恒型与非守恒型两种。从微分容积的角度，流体力学与传热学中的控制方程都是某一物理量在一无限小体积中守恒的数学描写。凡是描写某个物理量的控制方程能使该变量的总通量，即由扩散作用与对流作用所造成的总转移量，在任何有限大小的容积中都守恒，则该控制微分方程是守恒型的，否则为非守恒型。

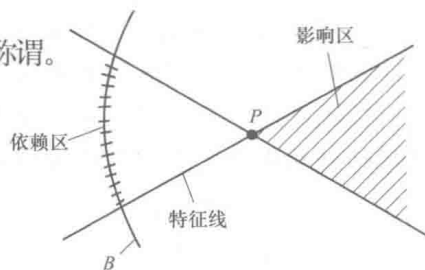


图 2-8 区域划分 (二)

第五节 热物理问题数值计算的基本步骤

一、数值计算的基本思想

数值计算是一种离散近似的计算方法。这种方法得到的是求解区域中某些代表性位置上未知（待求）物理量（速度、温度、浓度等）的近似值，而不是像分析解或近似分析解那样的连续函数，“数值解法”一词即由此而得名。

采用计算机进行数值计算不仅是求解偏微分方程的有力工具，而且对一些经验公式和用无穷级数表示的分析解，也常常需要用计算机来获得数值结果。

进行数值计算的基本思想为：把原来在时间、空间坐标上连续的物理量场（速度场、温度场、浓度场等）用求解区域中有限个离散点上的值的集合来代替，并按一定方式建立起关于这些值的代数方程，求解代数方程以获得物理量场的离散近似解。

二、基本步骤

例如，图 2-9 中长方柱体中的导热。已知条件：稳态、四个侧表面各自维持均匀温度，用数值方法求柱体中的温度分布。

求解基本步骤如下。

(1) 建立物理模型, 对问题进行必要的简化:

1) 假定涉及的温度变化范围不大, 即常物性;

2) 柱体长度方向端部效应忽略不计, 即

$\partial t / \partial z = 0$, $t = t(x, y) \rightarrow$ 二维问题

稳态、二维、常物性、无内热源的导热问题, 为第一类边界条件 (1st B. C.)。

(2) 建立相应的数学模型: 控制方程+单值性条件, 即

$$\partial^2 t / \partial x^2 + \partial^2 t / \partial y^2 = 0$$

边界条件: $x = L_1, t = t_1; x = -L_1, t = t_2$

$y = L_2, t = t_3; y = -L_2, t = t_4$

有的工程实际问题的模型化工作较难, 需要对实际问题进行仔细分析, 还需要经验。例如离散电阻片如图 2-10 所示。

特点: 温度分布在一定的深度不均匀, 畸变温度分布的不均匀性呈现周期性, 所以只研究一个周期区间即可。

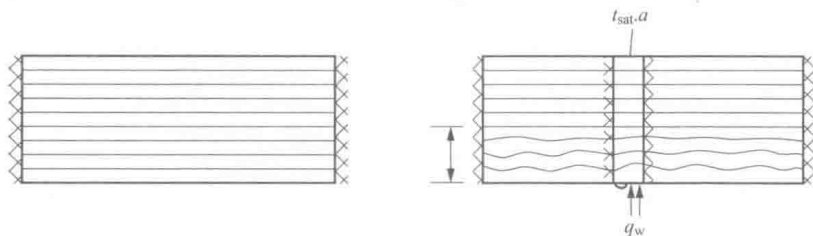


图 2-10 离散电阻片示意

(3) 区域离散化: 在计算区域中配置需要计算温度的位置, 称为节点。这一步骤称为区域离散化。

(4) 控制方程的离散化: 按照一定的原则 (通常是守恒原理), 建立每个节点上的未知量 (ϕ , 温度) 与其邻点上未知量之间的代数关系式 (称为离散方程), 即控制方程的离散化。例如, 由能量方程可以得出每一节点温度与相邻节点温度之间的代数关系。

(5) 采用合适的求解方法求解所得到的代数方程, 获得节点上的未知量之值。

(6) 对所获得的数值结果进行分析、比较和讨论。

基本步骤框图 (流程图) 如图 2-11 所示。

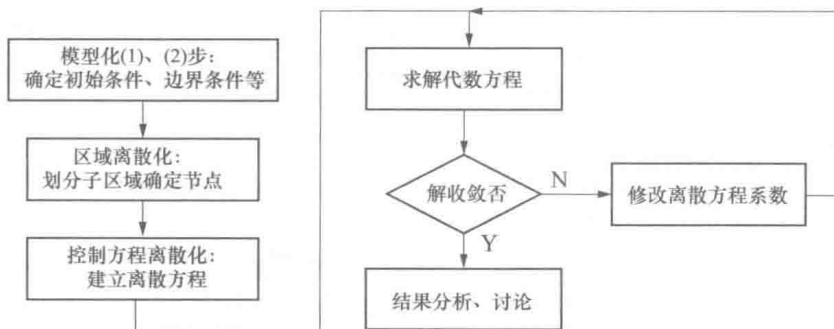


图 2-11 数值计算基本步骤框图