化工应用数学 第六章 偏微分方程简介 讲义

<u>常微分到偏微分</u>：

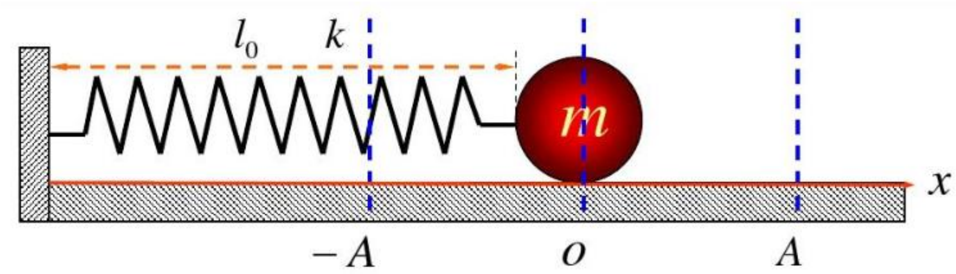
在物理、化学等领域使用到的方程大多是用来描述系统不同的状态随时间的变化，若不考虑稳态情况的话，决定一个方程是常微分方程还是偏微分方程就取决于系统不同状态的形式。

一般的，系统状态具有有限维度自由度的情况，方程属于常微分方程；而如果系统状态是一个连续变化的情况，方程属于偏微分方程。

对于稳态问题，由于不再有时间变量，所以系统可以有一个连续的状态，此时仍可使用常微分方程。

下面以实例来具体介绍：

1.单自由度系统：

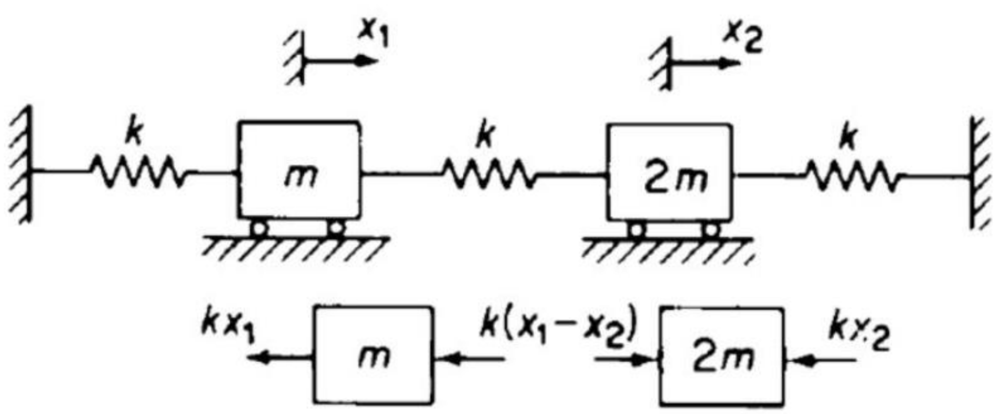


弹簧振子是一个典型的单自由度系统，既只通过一个物理量就能确定系统的状态，这里就是只通过振子的位置 x 就可以确定系统的状态，根据物理知识，可以知道，弹簧振子的振动方程为：

$$m\ddot{x} = -kx$$

这就是一个常微分方程。

2.双自由度系统：



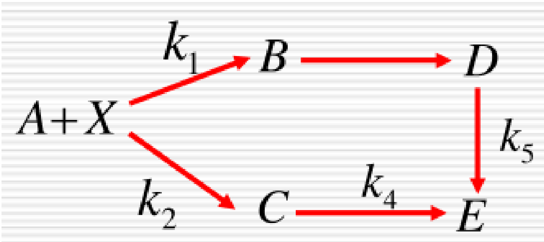
在上述弹簧振子模型中多加入一个物体（振子），就得到了双自由度的一个系统，根据受力分析可以得到：

$$m\ddot{x}_1 = -kx_1 + k(x_2 - x_1)$$
$$2m\ddot{x}_2 = -k(x_2 - x_1) - kx_2$$

这里是由两个常微分方程组成的常微分方程组。

3.多(有限)自由度系统：

当然，我们可以通过在弹簧振子模型中再多加入振子来实现多自由度系统，但这里我们来看一个跟化工有关的系统-复杂反应系统，其反应如下：



根据反应速度公式等，我们可以得到如下系统的控制方程:

$$\frac{dC_A}{dt} = -(k_1 + k_2)C_A$$
$$\frac{dC_B}{dt} = k_1 C_A - k_3 C_B$$
$$\frac{dC_C}{dt} = k_2 C_A - k_4 C_C$$
$$\frac{dC_D}{dt} = k_3 C_B - k_5 C_D$$
$$\frac{dC_E}{dt} = k_4 C_C + k_5 C_D$$

这里我们得到了由有限多个常微分方程组成的常微分方程组，但这里仍然是常微分问题。

4.连续系统：

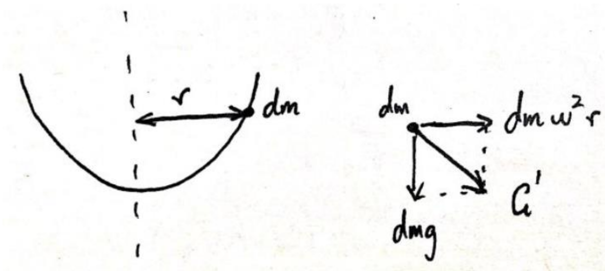
$$\overbrace{\rho}^{\substack{\text{质量}\\\text{流体密度}}}\left(\overbrace{\underbrace{\frac{\partial V}{\partial t}}_{\substack{\text{速度随时}\\\text{间变化}}} + \underbrace{V\cdot\nabla V}_{\substack{\text{流体运动的速}\\\text{度和方向}}}}^{\substack{\text{加速度}\\\text{一个粒子的速度如何随}\\\text{时间变化}}}\right) = \overbrace{\underbrace{\nabla P}_{\substack{\text{流体的内部压力}\\\text{梯度}\\\text{（压力的变化）}}} + \underbrace{\rho g}_{\substack{\text{作用在流体上}\\\text{的外力}\\\text{（如重力）}}} + \underbrace{\mu\nabla^2 V}_{\substack{\text{作用在流体上的内部}\\\text{应力}\\\text{（考虑到粘性效应）}}}}^{\substack{\text{力}\\\text{所有作用在流}\\\text{体上的力}}}$$

我们之前多次讲到的 NS 方程就是这方面的例子，根据实际问题的维度 d（可以等于 1、2 或者 3），系统具有 1+d 维的自由度，这里我们就只能使用偏微分方程来求解了。

5.稳态的 1 维连续问题：

求解底盘稳定旋转时，液面的形状。

受力分析：



根据受力分析可以得到微分方程：

$$\frac{dy}{dr}=\frac{\omega^2 r}{g}$$

求解即可发现：液面为抛物面，同时这种方式也可以用来测量重力加速度。

可以发现，当我们舍去连续的时间自由度之后，仅有一个方向的自由度，这时系统控制方程仍为常微分方程。

<u>偏微分方程求解</u>：

偏微分方程求解问题十分复杂，并没有统一的解析求解方式，我们这里并不去具体讲解双曲型、抛物线形和椭圆型等不同的类型。

与常微分方程不同，求解偏微分方程往往同时需要我们提供初值条件和边界条件。

在实际研究过程中，面对偏微分方程我们一般是使用现成的软件进行求解，

比如 Ansys/Fluent、OpenFOAM、MFIX 等，下面通过一些实际算例给大家展示这些软件在实际偏微分方程求解过程的应用。

1、鼓泡床模拟：Fluent&MFIX

控制方程：

$$\frac{\partial(\varepsilon_f \rho_f)}{\partial t}+\nabla\cdot(\varepsilon_f \rho_f \mathbf{u}_f)=0$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_f \rho_f \mathbf{u}_f)+\nabla\cdot(\varepsilon_f \rho_f \mathbf{u}_f \mathbf{u}_f)=-\varepsilon_f \nabla p_f+\nabla\cdot(\varepsilon_f \mathbf{T}_f)+\mathbf{F}_d+\varepsilon_f \rho_f \mathbf{g}$$

$$\frac{d\vec{x}_p}{dt}=\vec{U}_p$$

$$\frac{d\vec{U}_p}{dt}=-\frac{\nabla p}{\rho_s}-\frac{\nabla p_s}{\varepsilon_s \rho_s}+\vec{g}+\frac{\beta_p}{\rho_s}(\vec{U}_g(\vec{x}_p)-\vec{U}_p)$$

2.流化床提升管：Fluent

流化床提升管的计算问题和前面鼓泡床是一样的，都是气固两相流问题，其控制方程也与上述鼓泡床一致，只是边界条件的不同造成了最终计算结果和流动形态的不同。

3.结构化管式反应器：Fluent

单相流动，研究管道中气泡的分布从而优化结构设计

4.热裂钻：Fluent

研究火焰钻头的温度分布和岩石分裂