CFD中的能量方程

CFD难度 中级

1. 能量方程

质量守恒、动量守恒、能量守恒分别为三大守恒定律。由这些守恒定律可以分别推导出连续性方程、动量方程以及能量方程。因此，在某些情况下，连续性方程可用于求解密度ρ，动量方程可用于求解动量$\rho\mathbf{U}$，能量方程可用于求解能量E或温度T。

能量守恒定义为绝热系统的总能量是一个常数，总能量不能凭空的产生和消失。能量的单位为$\mathbf{J}=\mathbf{N}\cdot\mathbf{m}=\frac{\mathbf{kg}\cdot\mathbf{m}}{\mathbf{s}^2}\mathbf{m}$，在CFD中，通常用下述变量表示能量相关量：

- 比能：单位质量的总能量；
- 机械能：单位质量的动能；
- 比内能：单位质量的内能；
- 比焓：单位质量的焓；

上述变量单位均为$\left[\frac{\mathbf{m}^2}{\mathbf{s}^2}\right]$。其中比能为守恒变量。在无源项和沉降项的时候，比能其值不随时间变化。

1.1. 比能方程

比能由两方面构成，即机械能与比能之和。首先，定义机械能为K：

$$K=\frac{1}{2}|\mathbf{U}|^2 \tag{1}$$

其中$\mathbf{U}$为速度。单位质量的比内能定义为e。这样，比能E可表示为

$$E=K+e \tag{2}$$

若考虑每单位质量比能的变化关系，则将到处拉格朗日框架下的能量守恒方程。在这里考虑欧拉框架。在欧拉框架下，每单位体积比能的时间变化率，即为每单位质量的比能变化率再乘以密度：

$$\rho\frac{\mathrm{D}E}{\mathrm{D}t}\left[\frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{s}^3\cdot\mathrm{m}}\right]=\rho\frac{\mathrm{D}(K+e)}{\mathrm{D}t} \tag{3}$$

对于体积为$\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$的流体微元，其比能的时间变化率为

$$\rho\frac{\mathrm{D}E}{\mathrm{D}t}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\left[\frac{\mathrm{kg}\cdot\mathrm{m}^2}{\mathrm{s}^3}\right]=\rho\frac{\mathrm{D}(K+e)}{\mathrm{D}t}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \tag{4}$$

方程(4)构成欧拉框架下比能方程左边的部分。

接下来考虑能量方程右边的部分。正如之前所说的，流体微元能量的变化可能来自于

- 自发产生的能量；
- 流入流出的能量；
- 做功产生消失的能量；

首先考虑内部产生的能量。定义$\boldsymbol{r}\left[\frac{\mathrm{m}^2}{\mathrm{s}^3}\right]$为比热源，其表示每单位时间、每单位质量的能量产生。那么流体微元的净比热源可表示为

$$\rho r\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\left[\frac{\mathrm{kg}\cdot\mathrm{m}^2}{\mathrm{s}^3}\right] \tag{5}$$

考虑流入流出的能量。热传导（热流具有方向性）对流体微元的加热为（热通量矢量定义为$\mathbf{q}\left[\frac{\mathrm{w}}{\mathrm{m}^2}=\frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{s}^3}\right]$）

$$-\nabla\cdot\mathbf{q}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\left[\frac{\mathrm{kg}\cdot\mathrm{m}^2}{\mathrm{s}^3}\right] \tag{6}$$

依据傅里叶定律，$\mathbf{q}$和温度T的关系为

$$\mathbf{q}=-k\nabla T \tag{7}$$

接下来考虑做功引起的能量变化。单位时间内做功的变化为功率。作用在流体微元上的力，对其做功的功率等于这个力乘以速度在此力作用方向上的分量。因此压力的功率为：

$$-\nabla\cdot(p\mathbf{U})\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z=-\left(\frac{\partial up}{\partial x}+\frac{\partial vp}{\partial y}+\frac{\partial wp}{\partial z}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \tag{8}$$

剪切力对流体微团做功的功率为：

$$\nabla\cdot(\tau\cdot\mathbf{U})\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \tag{9}$$

重力矢量$\mathbf{g}$以体积力的方式作用于流体微元，引起重力势能的变化。单位时间内，重力做功的功率为

$$\rho\mathbf{g}\cdot\mathbf{U}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \tag{10}$$

结合方程(4)、(5)、(6)、(8)、(9)、(10)有最终的比能方程：

$$\rho\frac{\mathrm{D}(K+e)}{\mathrm{D}t}=\rho r-\nabla\cdot\mathbf{q}-\nabla\cdot(p\mathbf{U})+\nabla\cdot(\tau\cdot\mathbf{U})+\rho\mathbf{g}\cdot\mathbf{U}\tag{11}$$

其展开形式为

$$\rho\frac{\mathrm{D}(K+e)}{\mathrm{D}t}=\rho r-\frac{\partial\mathbf{q}_x}{\partial x}-\frac{\partial\mathbf{q}_y}{\partial y}-\frac{\partial\mathbf{q}_z}{\partial z}-\left(\frac{\partial up}{\partial x}+\frac{\partial vp}{\partial y}+\frac{\partial wp}{\partial z}\right)+\frac{\partial u\tau_{xx}}{\partial x}+\frac{\partial u\tau_{yx}}{\partial y}+$$

其中

$$\nabla\cdot(\tau\cdot\mathbf{U})=(\nabla\cdot\tau)\cdot\mathbf{U}+\tau:\nabla\mathbf{U}\tag{13}$$

从方程(11)左边可以看出其采用的是非守恒形式，且目前尚未封闭。

1.2. 比内能方程

方程(11)为严格的能量守恒方程。但是在CFD中通常的做法是抽离机械能（动能项）来获得一个比内能方程。首先有动量方程：

$$\rho\frac{\mathrm{D}\mathbf{U}}{\mathrm{D}t}=\nabla\cdot\tau+\rho\mathbf{g}-\nabla p\tag{14}$$

将动量方程中的每个速度分量方程乘以速度分量并加和有：

$$\rho\frac{\mathrm{D}\left[\frac{1}{2}\left(u_x^2+u_y^2+u_z^2\right)\right]}{\mathrm{D}t}=(\nabla\cdot\tau)\cdot\mathbf{U}+\rho\mathbf{g}\cdot\mathbf{U}-\mathbf{U}\cdot\nabla p\tag{15}$$

即：

$$\rho\frac{\mathrm{D}K}{\mathrm{D}t}=(\nabla\cdot\tau)\cdot\mathbf{U}+\rho\mathbf{g}\cdot\mathbf{U}-\mathbf{U}\cdot\nabla p\tag{16}$$

将方程(11)中减去方程(16)有比内能方程：

$$\rho\frac{\mathrm{D}e}{\mathrm{D}t}=-p\nabla\cdot\mathbf{U}-\nabla\cdot\mathbf{q}+\tau:\nabla\mathbf{U}+\rho r\tag{17}$$

可以看出，比内能方程中不含有体积力项。其守恒形式为：

$$\frac{\partial\rho e}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho\mathbf{U}e)=-p\nabla\cdot\mathbf{U}-\nabla\cdot\mathbf{q}+\tau:\nabla\mathbf{U}+\rho r\tag{18}$$

若考虑马赫数较小的情况，或认为不可压缩，则$-p\nabla\cdot\mathbf{U}=0$。同时，若进一步忽略粘性力做功项$\boldsymbol{\tau}:\nabla\mathbf{U}$有：

$$\frac{\partial\rho e}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho\mathbf{U}e)=-\nabla\cdot\mathbf{q}+\rho r \tag{19}$$

1.3. 温度方程

由比内能方程也可以转化为温度方程。温度和比内能的关系为

$$e=C_vT \tag{20}$$

进一步，α_{eff}可以表示为

$$\alpha_{\text{eff}}=\frac{k}{C_v},k=C_p\rho\kappa \tag{21}$$

将方程(20)代入到(31)，并假定恒定比热容有：

$$\frac{\partial\rho T}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho\mathbf{U}T)-\nabla\cdot(\frac{k}{C_v}\nabla T)=-\frac{1}{C_v}p\nabla\cdot\mathbf{U}+\frac{1}{C_v}\tau:\nabla\mathbf{U} \tag{22}$$

在马赫数较小的情况下，可以忽略压力做功项$-\frac{1}{C_v}p\nabla\cdot\mathbf{U}$，也即认为不可压缩，$\nabla\cdot\mathbf{U}=0$。同时忽略粘性力做功项且假定无热源有：

$$\frac{\partial\rho T}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho\mathbf{U}T)-\nabla\cdot\left(\frac{k}{C_v}\nabla T\right)=0 \tag{23}$$

1.4. 焓方程

对于可压缩流体，通常把总能量方程简化为焓方程。首先有比焓h以及总比焓h_0的定义：

$$h=e+\frac{p}{\rho} \tag{24}$$

$$h_0=h+K=e+\frac{p}{\rho}+K \tag{25}$$

回到非守恒形式的方程(11)，调用连续性方程后有守恒形式的总能量方程：

$$\frac{\partial\rho e}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho\mathbf{U}e)+\frac{\partial\rho K}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho\mathbf{U}K)=-\nabla\cdot(p\mathbf{U})+\rho r-\nabla\cdot\mathbf{q}+\rho\mathbf{g}\cdot\mathbf{U}+\nabla\cdot(\tau\cdot\mathbf{U})$$

把方程(24)代入到方程(26)中有守恒形式的比焓方程：

$$\frac{\partial\rho h}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho\mathbf{U}h)+\frac{\partial\rho K}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho\mathbf{U}K)=\frac{\partial p}{\partial t}+\rho r-\nabla\cdot\mathbf{q}+\rho\mathbf{g}\cdot\mathbf{U}+\nabla\cdot(\tau\cdot\mathbf{U}) \tag{27}$$

以及守恒形式的总比焓方程：

$$\frac{\partial \rho h_0}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} h_0) = \frac{\partial p}{\partial t} + \rho r - \nabla \cdot \mathbf{q} + \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{U} + \nabla \cdot (\tau \cdot \mathbf{U}) \tag{28}$$

再一次的，总比焓方程尚未封闭。

1.5. 封闭

假设$\mathbf{q} = -\alpha_{\text{eff}} \nabla e$或$\mathbf{q} = -\alpha_{\text{eff}} \nabla h$，这样方程(26)、方程(27)、方程(18)则简化为（无热源$r=0$）：

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} e) + \frac{\partial \rho K}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} K) - \nabla \cdot (\alpha_{\text{eff}} \nabla e) = -\nabla \cdot (p \mathbf{U}) \tag{29}$$

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} h) + \frac{\partial \rho K}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} K) - \nabla \cdot (\alpha_{\text{eff}} \nabla h) = \frac{\partial p}{\partial t} \tag{30}$$

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} e) - \nabla \cdot (\alpha_{\text{eff}} \nabla e) = -p \nabla \cdot \mathbf{U} + \tau : \nabla \mathbf{U} \tag{31}$$

其分别为比能方程、比焓方程以及比内能方程。其中的K通过方程(1)更新，且其中的速度项通过分离/耦合式算法求解，因此得以封闭。

比能方程、比焓方程以及比内能方程在求解的时候哪一个最优呢？目前从经验来看，传热、可压缩、化学反应求解器使用的主要为比能方程和比焓方程。并且，在低马赫数燃烧流中，(26)和方程(27)中的$\nabla \cdot (\tau \cdot \mathbf{U})$（粘性力做功）以及$\rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{U}$（重力做功）通常被忽略。一些文献表示，能量方程的选择在某些情况下是至关紧要的。比如在进行激波捕获计算的时候，求解总能量方程要比求解内能方程结果精确的多。因此在rhoCentralFoam中，则植入了粘性力做功，并且求解的为比能方程。

在不可压缩流动中，通常求解比内能方程。只要温度对流体的影响不是很重要，那么能量方程可以放在压力速度耦合之后进行求解。在这种情况下是一种单向耦合。同时，需要注意的是比内能方程实际上来源于动量方程。但是总能量方程以及焓方程却可以单独推导。在某些情况下求解比内能方程可能会带来一些问题。同时，对于不可压缩流体，能量的增加很少见，能量的耗散却比较明显。对于可压缩流，双方都比较重要。

2. Boussinesq假定

下面考虑传热领域的Boussinesq假定，而不是湍流以及本构方程领域的Boussinesq近似/假定。

在传热领域内，Boussinesq假定认为在流动中温度的变化是非常小的，因此对应的密度变化也非常小。所以在控制方程中，除了浮力项$\rho \mathbf{g}$，其他项的密度被认为是常数。Boussinesq假定使得方程的非线性特性降低。但由于Boussinesq假定的限定条件，也使得调用Boussinesq假定的求解器存在一定的限制。在工程中，Boussinesq假定主要用于室温下的液体对流、建筑物对流、气相分散等。

在温度变化比较大的情况下，不建议使用Boussinesq假定。Boussinesq假定认为流体的密度可以这样计算：

$$\rho = \rho_{\mathrm{ref}}(1 - \beta(T - T_{\mathrm{ref}})) \tag{32}$$

其中ρ表示流体的密度，ρ_{ref}表示流体的参考密度，T表示流体的温度，T_{ref}表示流体的参考温度，β表示流体的体膨胀系数。现考虑可压缩流体并附加重力的动量方程：

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^{\mathbf{T}})) - \frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot \mathbf{U})\mathbf{I} + \rho \mathbf{g} \tag{33}$$

依据Boussinesq假定，认为浮力项外的密度为常数，因此提出ρ有：

$$\rho\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \rho\nabla \cdot (\mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^{\mathbf{T}})) - \frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot \mathbf{U})\mathbf{I} + \rho \mathbf{g} \tag{34}$$

对于连续性方程，同样的，如果认为密度为常数，有连续性方程：

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \tag{35}$$

把连续性方程(35)带入到动量方程(34)中有：

$$\rho\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \rho\nabla \cdot (\mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu\nabla \mathbf{U}) + \rho \mathbf{g} \tag{36}$$

将方程(32)代入到(36)中：

$$\rho\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \rho\nabla \cdot (\mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu\nabla \mathbf{U}) + (\rho_{\mathrm{ref}}(1 - \beta(T - T_{\mathrm{ref}})))\mathbf{g} \tag{37}$$

令：

$$\rho_k = \frac{(\rho_{\mathrm{ref}}(1 - \beta(T - T_{\mathrm{ref}})))}{\rho} \tag{38}$$

有：

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) = -\nabla \frac{p}{\rho} + \nabla \cdot (\nu\nabla \mathbf{U}) + \rho_k \mathbf{g} \tag{39}$$

方程(39)即为考虑Boussinesq假定的动量方程。可以看出调用Boussinesq假定的动量方程为不可压缩的。在调用Boussinesq假定的情况下，如果温差较低的情况下（如空气的15°温差内），误差将在1%以下。如果温差过大，调用Boussinesq假定可能会带来较大的误差。

2019.7.10增加温度方程 | 2019.6.30小修

勘误、讨论、补充内容请前往CFD中文网