

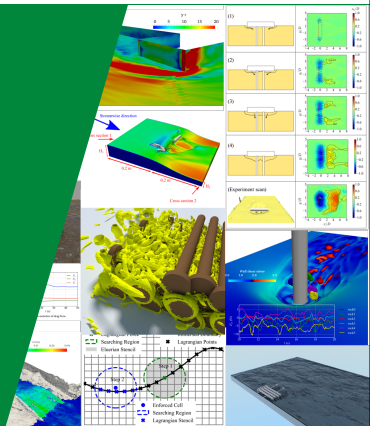


2024年春季《计算流体力学编程实践》

2.1 复习流体力学方程

徐云成

✉ycxu@cau.edu.cn



2024 年 3 月 13 日

- ▶ 张量 Tensor Notation
- ▶ 控制方程 Governing Equations
 - 通用输运方程 Generic Transport Equation
 - 源汇 Sources and Sinks
 - 扩散输运 Diffusive Transport
- ▶ 偏微分方程 PDE
- ▶ 边界条件 Boundary Conditions
- ▶ 初始条件 Initial Conditions



- ▶ OpenFOAM® 使用右手直角坐标系
Right handed Cartesian coordinate system
- ▶ 张量具有不同秩和阶数
Tensors with different ranks and orders
 - 标量 Scalars in lowercase:
 a (rank 0) (first-order)
 - 矢量 Vectors in bold:
 $\mathbf{a} = (a_1, a_2, a_3)$, or \vec{a} (rank 1) (second-order)
 - 张量 Tensors in bold capital:
 $\mathbf{T} = T_{ij}$, or \vec{T} (rank 2) (third-order)

$$\mathbf{T} = T_{ij} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{pmatrix} \quad (1)$$

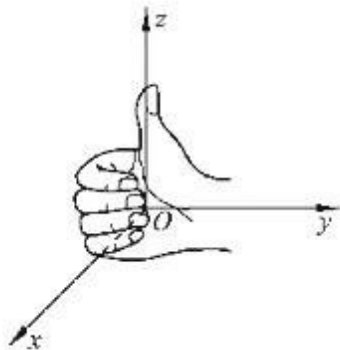


图: 右手直角坐标系

- CFD中绝大多数控制方程是偏微分方程（PDE），我们首先简要回顾一些常见的偏导数计算公式。如果两个函数项 f 和 g 的对自变量 x 进行求导，那么可以得到：

$$\frac{\partial(f+g)}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial g}{\partial x} \quad (2)$$

- 如果对两个函数项的积进行求导，则可以得到以下等式：

$$\frac{\partial fg}{\partial x} = g \frac{\partial f}{\partial x} + f \frac{\partial g}{\partial x} \quad (3)$$

- 如果再乘以一个常数项，那么可以得到：

$$\frac{\partial Cfg}{\partial x} = C \frac{\partial fg}{\partial x} \quad (4)$$



- CFD中绝大多数控制方程是偏微分方程 (PDE)，我们首先简要回顾一些常见的偏导数计算公式。如果两个函数项 f 和 g 的对自变量 x 进行求导，那么可以得到：

$$\frac{\partial(f+g)}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial g}{\partial x} \quad (2)$$

- 如果对两个函数项的积进行求导，则可以得到以下等式：

$$\frac{\partial fg}{\partial x} = g \frac{\partial f}{\partial x} + f \frac{\partial g}{\partial x} \quad (3)$$

- 如果再乘以一个常数项，那么可以得到：

$$\frac{\partial Cfg}{\partial x} = C \frac{\partial fg}{\partial x} \quad (4)$$



- CFD中绝大多数控制方程是偏微分方程 (PDE)，我们首先简要回顾一些常见的偏导数计算公式。如果两个函数项 f 和 g 的对自变量 x 进行求导，那么可以得到：

$$\frac{\partial(f+g)}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial g}{\partial x} \quad (2)$$

- 如果对两个函数项的积进行求导，则可以得到以下等式：

$$\frac{\partial fg}{\partial x} = g \frac{\partial f}{\partial x} + f \frac{\partial g}{\partial x} \quad (3)$$

- 如果再乘以一个常数项，那么可以得到：

$$\frac{\partial Cfg}{\partial x} = C \frac{\partial fg}{\partial x} \quad (4)$$



► 纳布拉算子 ∇

$$\nabla \equiv \partial_i \equiv \frac{\partial}{\partial x_i} \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3} \right) \quad (5)$$



- ▶ 爱因斯坦求和约定 Einstein's summation convention (Einstein notation):

$$a_i b_i = \sum_{i=1}^3 = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 \quad (6)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = \nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \quad (7)$$

- ▶ 内积（降阶）和外积（升阶） Inner and outer product of vectors and tensors
 - Scalar product: $\mathbf{a} \mathbf{b} = a b_i$
 - Inner vector product, producing a scalar: $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_i b_i$
 - Outer vector product, producing a second rank tensor: $\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} = \mathbf{a} \mathbf{b}^T$
 - Inner product of a vector and a tensor
 - product from the left: $\mathbf{a} \cdot \mathbf{T} = a_i T_{ij}$
 - product from the right: $\mathbf{T} \cdot \mathbf{a} = a_j T_{ij}$



- 梯度 Gradient of s

$$\nabla s = \left(\frac{\partial s}{\partial x_1}, \frac{\partial s}{\partial x_2}, \frac{\partial s}{\partial x_3} \right) \quad (8)$$

Gradient can operate on any tensor field to produce a tensor field one rank higher.

$$s \text{ is a scalar} \Rightarrow \nabla s \text{ is a vector} \quad (9)$$

$$\mathbf{s} \text{ is a vector} \Rightarrow \nabla \mathbf{s} \text{ is a second-order tensor} \quad (10)$$

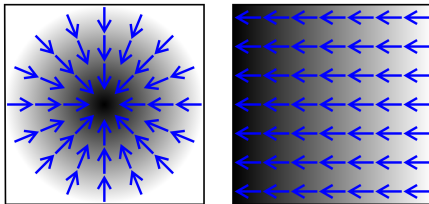


图: 梯度 source from Wikipedia

- 散度 Divergence of \mathbf{a}

$$\nabla \cdot \mathbf{a} = \frac{\partial \mathbf{a}_1}{\partial x_1} + \frac{\partial \mathbf{a}_2}{\partial x_2} + \frac{\partial \mathbf{a}_3}{\partial x_3} \quad (11)$$

Divergence can operate on any tensor field to produce a tensor field one rank lower.

$$\nabla \cdot \mathbf{T} = \partial_i T_{ij} = \begin{pmatrix} \frac{\partial T_{11}}{\partial x_1} + \frac{\partial T_{12}}{\partial x_2} + \frac{\partial T_{13}}{\partial x_3} \\ \frac{\partial T_{21}}{\partial x_1} + \frac{\partial T_{22}}{\partial x_2} + \frac{\partial T_{23}}{\partial x_3} \\ \frac{\partial T_{31}}{\partial x_1} + \frac{\partial T_{32}}{\partial x_2} + \frac{\partial T_{33}}{\partial x_3} \end{pmatrix} \quad (12)$$



- ▶ 旋度 Curl of a vector field **a** (related to vorticity)

$$\nabla \times \mathbf{a} = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ \frac{\partial}{\partial x_1} & \frac{\partial}{\partial x_2} & \frac{\partial}{\partial x_3} \\ a_1 & a_2 & a_3 \end{vmatrix} \quad (13)$$

$$= \left(\frac{\partial a_3}{\partial x_2} - \frac{\partial a_2}{\partial x_3}, \frac{\partial a_1}{\partial x_3} - \frac{\partial a_3}{\partial x_1}, \frac{\partial a_2}{\partial x_1} - \frac{\partial a_1}{\partial x_2} \right) \quad (14)$$

- ▶ 拉普拉斯算子 Laplacian: related to diffusion; transform a tensor field into another tensor field of the same rank

$$\nabla^2 a = \nabla \cdot \nabla a = \frac{\partial^2 a}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 a}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 a}{\partial x_3^2} \quad (15)$$

Laplacian operator is equivalent to “the divergence of the gradient field”.



- ▶ 时间导数 Temporal derivative: change with time

$$\text{total or material time derivative: } \frac{D\phi}{Dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta\phi}{\Delta t} \quad (16)$$

$$\text{spatial time derivative: } \frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial\phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\phi \quad (17)$$

\mathbf{u} 是影响变量 ϕ 的对流速度



- ▶ 控制方程是用数学方式描述以下物理守恒规律：
 - 质量守恒
 - 牛顿第二定律（动量守恒）：动量变化等于受力总和
 - 热力学第一定律（能量守恒）：能量变化等于热量变化和做功之和
- ▶ 流体被当作连续体，忽略分子结构



Rate of increase of mass in a C.V. = net rate of mass flow into the C.V

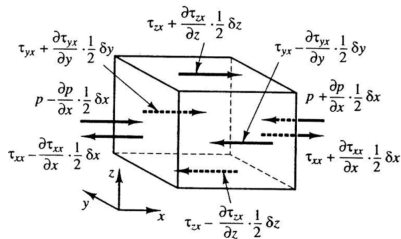


图: 控制体积, Control Volume, CV, C.V.

► Unsteady, 3D:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (18)$$

or

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (19)$$

► if incompressible, $\rho = \text{const}$, then

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (20)$$

Rate of increase of mass in a C.V. = net rate of mass flow into the C.V

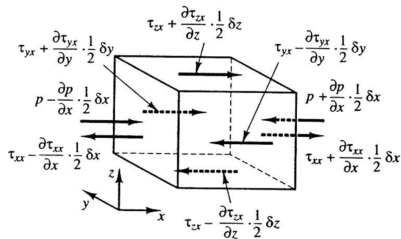


图: 控制体积, Control Volume, CV, C.V.

► Unsteady, 3D:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (18)$$

or

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (19)$$

► if incompressible, $\rho = \text{const}$, then

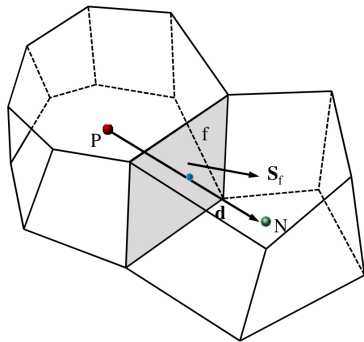
$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (20)$$

RTT stands for Reynolds Transport Theorem

- ▶ 雷诺传输定理也称为莱布尼兹-雷诺传输定理
Reynolds transport theorem is also known as the Leibniz-Reynolds' transport theorem.
- ▶ 是以积分符号内取微分闻名的莱布尼兹积分律的三维推广

It is a 3D generalization of the Leibniz integral rule which is also known as differentiation under the integral sign.

- ▶ It can be used to assemble the standard transport equation for a generic property ϕ

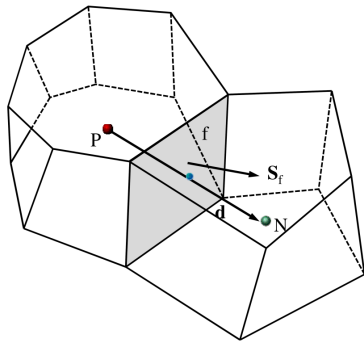


RTT stands for Reynolds Transport Theorem

- 对于任意形状的控制体积：
系统中 ϕ 的变化率等于控制体积内 ϕ 的变化率加上
通过控制体积面上的净出流量

$$\frac{d}{dt} \int_{V_m} \phi dV = \int_{V_m} \frac{\partial \phi}{\partial t} dV + \oint_{S_m} \phi (\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}) dS \quad (21)$$

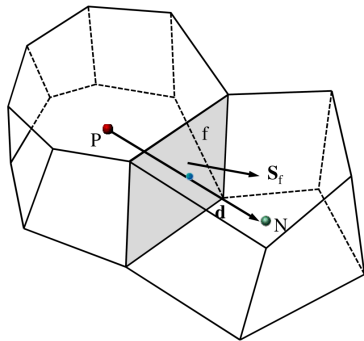
$$\frac{d}{dt} \int_V \phi dV = \int_V \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) \right] dV \quad (22)$$



- 高斯定理：面积分(surface integral)转变为体积分(volume integral)

$$\oint_{S_m} \phi(\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}) dS = \int_V [\nabla \cdot (\phi \mathbf{u})] dV \quad (23)$$

- 上式中 \mathbf{u} 代表对流速度 (convective velocity)，进入控制体积的流率(flux)为负，也即 $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} < 0$
- \mathbf{u} 是关于时间和空间的函数



微分形式控制方程

6/39

前面的通用方程是积分形式(integral form), 我们也可以写成微分形式(differential form)

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{\partial\phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) \quad (24)$$

continuity	$\phi = \rho$	$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u})$
x-momentum	$\phi = \rho u$	$\frac{d\rho u}{dt} = \frac{\partial\rho u}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \mathbf{u})$
y-momentum	$\phi = \rho v$	$\frac{d\rho v}{dt} = \frac{\partial\rho v}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v \mathbf{u})$
z-momentum	$\phi = \rho w$	$\frac{d\rho w}{dt} = \frac{\partial\rho w}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho w \mathbf{u})$
concentration	$\phi = c$	$\frac{dc}{dt} = \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c \mathbf{u})$



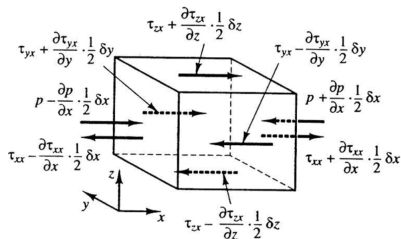


图: 控制体积, Control Volume, CV, C.V.

- ▶ 牛顿第二定律: 动量变化率等于受力总和
- ▶ 各方向上的动量变化: $\rho \frac{du}{dt}$, $\rho \frac{dv}{dt}$, $\rho \frac{dw}{dt}$
- ▶ 受力可能是
 - 面力: 压力(pressure force)、黏性力(viscous force)、表面张力(surface tension force)等
 - 体力: 重力(gravity force)、离心力(centrifugal force)、科氏力(科里奥利力, Coriolis force)、电磁力(electromagnetic force)等

应用牛顿第二定律，动量方程将变成

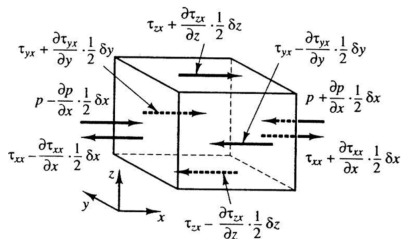


图: 控制体积, Control Volume, CV, C.V.

$$\rho \frac{du}{dt} = \frac{\partial(-p + \tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + S_{Mx} \quad (25)$$

$$\rho \frac{dv}{dt} = \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial(-p + \tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + S_{My} \quad (26)$$

$$\rho \frac{dw}{dt} = \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial(-p + \tau_{zz})}{\partial z} + S_{Mz} \quad (27)$$

- ▶ S_{Mx} , S_{My} , S_{Mz} 是源项，可能是重力等
- ▶ 压力梯度前的负号是由于定义了拉伸压力为正

张量形式:

$$\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{S}_M \quad (28)$$

其中 $\boldsymbol{\sigma}$ 是所谓的柯西应力张量(Cauchy stress tensor), a rank-two symmetric tensor(二秩对称张量) given by its covariant components

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad (29)$$



拆分成两项

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sigma_{xx} + p & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_{yy} + p & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_{zz} + p \end{pmatrix} \quad (30)$$

$$= -p\mathbb{I} + \mathbb{T} \quad (31)$$

其中 \mathbb{I} 是单位矩阵(identity matrix), \mathbb{T} 是偏应力张量(deviatoric stress tensor)。压力等于负的平均正应力(normal stress)。



- ▶ 我们试图得到牛顿流体运动的控制方程，例如Navier-Stokes equation
- ▶ 因此，我们需要定义切应力(shear stress)，例如用一个合适的流变模型(rheological model)定义 τ_{ij}
- ▶ 对于牛顿流体，最简单的模型是线性模型： $\tau \propto \frac{\partial u}{\partial y}$

$$\mathbb{T} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \delta_{ij} \frac{\lambda}{\mu} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \delta_{ij} \lambda \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \quad (32)$$

偏形变张量与偏应力张量呈 μ 倍关系

黏性系数定义(viscosity):

- ▶ dynamic viscosity(动力黏性系数) μ : 应力与线性形变相关
- ▶ second viscosity(第二黏性系数) λ : 应力与体积形变相关，实际上作用很小，在不可压缩流动时，由于 $\frac{\partial u_k}{\partial x_k} = 0$ ， λ 就不重要了。



- ▶ 我们试图得到牛顿流体运动的控制方程，例如Navier-Stokes equation
- ▶ 因此，我们需要定义切应力(shear stress)，例如用一个合适的流变模型(rheological model)定义 τ_{ij}
- ▶ 对于牛顿流体，最简单的模型是线性模型： $\tau \propto \frac{\partial u}{\partial y}$

$$\mathbb{T} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \delta_{ij} \frac{\lambda}{\mu} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \delta_{ij} \lambda \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \quad (32)$$

偏形变张量与偏应力张量呈 μ 倍关系

黏性系数定义(viscosity):

- ▶ dynamic viscosity(动力黏性系数) μ : 应力与线性形变相关
- ▶ second viscosity(第二黏性系数) λ : 应力与体积形变相关，实际上作用很小，在不可压缩流动时，由于 $\frac{\partial u_k}{\partial x_k} = 0$ ， λ 就不重要了。



- ▶ 我们试图得到牛顿流体运动的控制方程，例如Navier-Stokes equation
- ▶ 因此，我们需要定义切应力(shear stress)，例如用一个合适的流变模型(rheological model)定义 τ_{ij}
- ▶ 对于牛顿流体，最简单的模型是线性模型： $\tau \propto \frac{\partial u}{\partial y}$

$$\mathbb{T} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \delta_{ij} \frac{\lambda}{\mu} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \delta_{ij} \lambda \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \quad (32)$$

偏形变张量与偏应力张量呈 μ 倍关系

黏性系数定义(viscosity):

- ▶ dynamic viscosity(动力黏性系数) μ : 应力与线性形变相关
- ▶ second viscosity(第二黏性系数) λ : 应力与体积形变相关，实际上作用很小，在不可压缩流动时，由于 $\frac{\partial u_k}{\partial x_k} = 0$ ， λ 就不重要了。



Navier-Stokes equations

22/39

将牛顿流体关系放入动量方程，我们可以得到可压缩流体N-S方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (33)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu(\nabla \mathbf{u} + (\mathbf{u})^T)) + \rho \mathbf{g} \quad (34)$$

同样可得不可压缩流体N-S方程

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (35)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot (\nu(\nabla \mathbf{u} + (\mathbf{u})^T)) + \mathbf{g} \quad (36)$$

$\nu = \mu/\rho$ 是运动黏性系数(kinematic viscosity)，在实际处理中，不可压缩方程中的 p 通常已除过密度 ρ



将牛顿流体关系放入动量方程，我们可以得到可压缩流体N-S方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (33)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu(\nabla \mathbf{u} + (\mathbf{u})^T)) + \rho \mathbf{g} \quad (34)$$

同样可得不可压缩流体N-S方程

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (35)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot (\nu(\nabla \mathbf{u} + (\mathbf{u})^T)) + \mathbf{g} \quad (36)$$

$\nu = \mu/\rho$ 是运动黏性系数(kinematic viscosity)，在实际处理中，不可压缩方程中的 p 通常已除过密度 ρ



Navier-Stokes equations

23/39

将牛顿流体关系放入动量方程，我们可以得到可压缩流体N-S方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (37)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu(\nabla \mathbf{u} + (\mathbf{u})^T)) + \rho \mathbf{g} \quad (38)$$

同样可得不可压缩流体N-S方程

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (39)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot (\nu(\nabla \mathbf{u} + (\mathbf{u})^T)) + \mathbf{g} \quad (40)$$

$\nu = \mu/\rho$ 是运动黏性系数(kinematic viscosity)，在实际处理中，不可压缩方程中的 p 通常已除过密度 ρ



- ▶ OpenFOAM® 主要是对这类通用输运方程进行离散
- ▶ OpenFOAM® 中的模型方程可能很复杂，含有多个源/汇项，但是基本形式是一样的
- ▶ 无论方程怎么变，基本上都是考虑这么一组算子：时间偏导(temporal derivative)、梯度(gradient)、散度(divergence)、拉普拉斯(Laplacian)、旋度(Curl)，还有一些源(source)/汇(sink)项

$$\underbrace{\frac{\partial \phi}{\partial t}}_{\substack{\text{temporal derivative} \\ \text{时间偏导}}} + \underbrace{\nabla \cdot (\phi \mathbf{u})}_{\substack{\text{convection term} \\ \text{对流项}}} - \underbrace{\nabla \cdot (\lambda \nabla \phi)}_{\substack{\text{diffusion term} \\ \text{扩散项}}} = \underbrace{\mathbf{S}_\phi}_{\substack{\text{source term} \\ \text{源项}}} \quad (41)$$

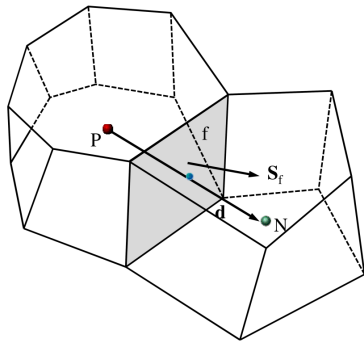


面源(volume sources)和体源(surface sources)

- ▶ 体源：贯穿整个体积
- ▶ 面源：作用在表面 S （比如加热），通过用梯度模型建模

$$\text{积分: } \frac{d}{dt} \int_V \phi dV = \int_V q_V dV - \oint_S (\mathbf{n} \cdot \vec{q}_S) dS \quad (42)$$

$$\text{微分: } \frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) = q_V - \nabla \cdot \vec{q}_S \quad (43)$$

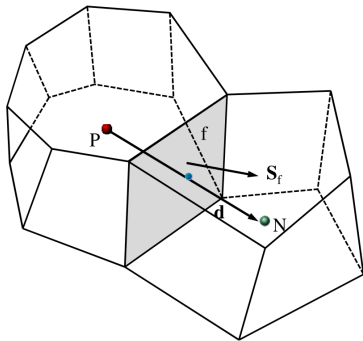


如何模拟扩散输移:

- ▶ 面源项的模型是基于梯度的输移过程
- ▶ 考虑一个浓度标量 ϕ 以及一个封闭空间，扩散输移是指 ϕ 从高浓度区域输移到低浓度区域，直至每个地方都均匀
- ▶ $\nabla\phi$ 是浓度的斜度/梯度，输移会发生在其反方向，因此定义扩散模型为

$$\vec{q}_s = -\gamma \nabla \phi \quad (44)$$

γ 是扩散系数(diffusivity)

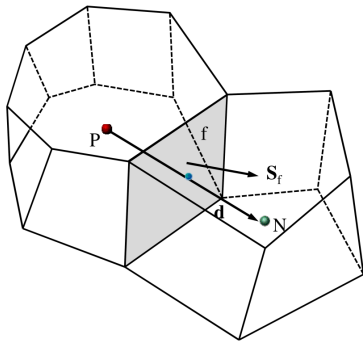


如何模拟扩散输移:

- ▶ 面源项的模型是基于梯度的输移过程
- ▶ 考虑一个浓度标量 ϕ 以及一个封闭空间，扩散输移是指 ϕ 从高浓度区域输移到低浓度区域，直至每个地方都均匀
- ▶ $\nabla\phi$ 是浓度的斜度/梯度，输移会发生在其反方向，因此定义扩散模型为

$$\vec{q}_s = -\gamma \nabla \phi \quad (44)$$

γ 是扩散系数(diffusivity)

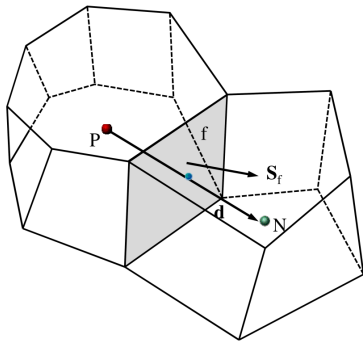


如何模拟扩散输移:

- ▶ 面源项的模型是基于梯度的输移过程
- ▶ 考虑一个浓度标量 ϕ 以及一个封闭空间，扩散输移是指 ϕ 从高浓度区域输移到低浓度区域，直至每个地方都均匀
- ▶ $\nabla\phi$ 是浓度的斜度/梯度，输移会发生在其反方向，因此定义扩散模型为

$$\vec{q}_s = -\gamma \nabla \phi \quad (44)$$

γ 是扩散系数(diffusivity)

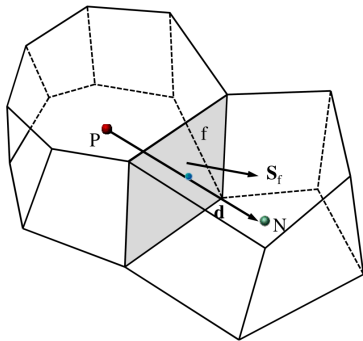


如何模拟扩散输移:

- ▶ 面源项的模型是基于梯度的输移过程
- ▶ 考虑一个浓度标量 ϕ 以及一个封闭空间，扩散输移是指 ϕ 从高浓度区域输移到低浓度区域，直至每个地方都均匀
- ▶ $\nabla\phi$ 是浓度的斜度/梯度，输移会发生在其反方向，因此定义扩散模型为

$$\vec{q}_s = -\gamma \nabla \phi \quad (44)$$

γ 是扩散系数(diffusivity)

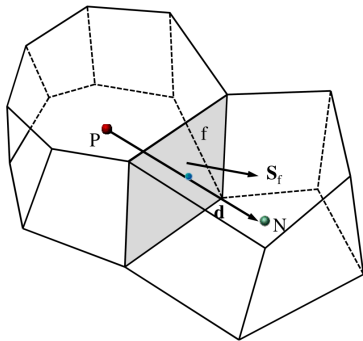


如何模拟扩散输移:

- ▶ 面源项的模型是基于梯度的输移过程
- ▶ 考虑一个浓度标量 ϕ 以及一个封闭空间，扩散输移是指 ϕ 从高浓度区域输移到低浓度区域，直至每个地方都均匀
- ▶ $\nabla\phi$ 是浓度的斜度/梯度，输移会发生在其反方向，因此定义扩散模型为

$$\vec{q}_s = -\gamma \nabla \phi \quad (44)$$

γ 是扩散系数(diffusivity)



$$\underbrace{\frac{\partial \phi}{\partial t}}_{\substack{\text{temporal derivative} \\ \text{时间偏导}}} + \underbrace{\nabla \cdot (\phi \mathbf{u})}_{\substack{\text{convection term} \\ \text{对流项}}} - \underbrace{\nabla \cdot (\lambda \nabla \phi)}_{\substack{\text{diffusion term} \\ \text{扩散项}}} = \underbrace{S_\phi}_{\substack{\text{source term} \\ \text{源项}}} \quad (45)$$

- ▶ 时间偏导是指系统的惯性
- ▶ 对流项是指已知速度场形成的对流输运，这项具有双曲（hyperbolic）特性：信息来自周边，定义为对流速度方向
- ▶ 扩散项是指梯度输运，具有椭圆（elliptic）特性：空间内任意位置都会同时受到其它所有位置的影响
- ▶ 源项是指非输运过程，局部空间内 ϕ 的生成(production)或者破坏(destruction)



$$\underbrace{\frac{\partial \phi}{\partial t}}_{\substack{\text{temporal derivative} \\ \text{时间偏导}}} + \underbrace{\nabla \cdot (\phi \mathbf{u})}_{\substack{\text{convection term} \\ \text{对流项}}} - \underbrace{\nabla \cdot (\lambda \nabla \phi)}_{\substack{\text{diffusion term} \\ \text{扩散项}}} = \underbrace{S_\phi}_{\substack{\text{source term} \\ \text{源项}}} \quad (45)$$

- ▶ 时间偏导是指系统的惯性
- ▶ 对流项是指已知速度场形成的对流输运，这项具有双曲（hyperbolic）特性：信息来自周边，定义为对流速度方向
- ▶ 扩散项是指梯度输运，具有椭圆（elliptic）特性：空间内任意位置都会同时受到其它所有位置的影响
- ▶ 源项是指非输运过程，局部空间内 ϕ 的生成(production)或者破坏(destruction)



$$\underbrace{\frac{\partial \phi}{\partial t}}_{\substack{\text{temporal derivative} \\ \text{时间偏导}}} + \underbrace{\nabla \cdot (\phi \mathbf{u})}_{\substack{\text{convection term} \\ \text{对流项}}} - \underbrace{\nabla \cdot (\lambda \nabla \phi)}_{\substack{\text{diffusion term} \\ \text{扩散项}}} = \underbrace{S_\phi}_{\substack{\text{source term} \\ \text{源项}}} \quad (45)$$

- ▶ 时间偏导是指系统的惯性
- ▶ 对流项是指已知速度场形成的对流输运，这项具有双曲（hyperbolic）特性：信息来自周边，定义为对流速度方向
- ▶ 扩散项是指梯度输运，具有椭圆（elliptic）特性：空间内任意位置都会同时受到其它所有位置的影响
- ▶ 源项是指非输运过程，局部空间内 ϕ 的生成(production)或者破坏(destruction)



$$\underbrace{\frac{\partial \phi}{\partial t}}_{\substack{\text{temporal derivative} \\ \text{时间偏导}}} + \underbrace{\nabla \cdot (\phi \mathbf{u})}_{\substack{\text{convection term} \\ \text{对流项}}} - \underbrace{\nabla \cdot (\lambda \nabla \phi)}_{\substack{\text{diffusion term} \\ \text{扩散项}}} = \underbrace{S_\phi}_{\substack{\text{source term} \\ \text{源项}}} \quad (45)$$

- ▶ 时间偏导是指系统的惯性
- ▶ 对流项是指已知速度场形成的对流输运，这项具有双曲（hyperbolic）特性：信息来自周边，定义为对流速度方向
- ▶ 扩散项是指梯度输运，具有椭圆（elliptic）特性：空间内任意位置都会同时受到其它所有位置的影响
- ▶ 源项是指非输运过程，局部空间内 ϕ 的生成(production)或者破坏(destruction)



$$\underbrace{\frac{\partial \phi}{\partial t}}_{\substack{\text{temporal derivative} \\ \text{时间偏导}}} + \underbrace{\nabla \cdot (\phi \mathbf{u})}_{\substack{\text{convection term} \\ \text{对流项}}} - \underbrace{\nabla \cdot (\lambda \nabla \phi)}_{\substack{\text{diffusion term} \\ \text{扩散项}}} = \underbrace{S_\phi}_{\substack{\text{source term} \\ \text{源项}}} \quad (45)$$

- ▶ 时间偏导是指系统的惯性
- ▶ 对流项是指已知速度场形成的对流输运，该项具有双曲（hyperbolic）特性：信息来自周边，定义为对流速度方向
- ▶ 扩散项是指梯度输运，具有椭圆（elliptic）特性：空间内任意位置都会同时受到其它所有位置的影响
- ▶ 源项是指非输运过程，局部空间内 ϕ 的生成(production)或者破坏(destruction)



偏微分方程PDE的分类

28/39

PDE: partial differential equation

- ▶ Elliptic 椭圆型: 描述某种现象朝所有方向发展, 强度逐渐衰减, 结果是平滑的, 例如, 稳定的热传导方程和拉普拉斯方程, 亚音速下的流体运动通常可以用椭圆型偏微分方程 (elliptic PDE) 表示
- ▶ Hyperbolic 双曲型: 描述某种现象朝特定方向发展, 强度倾向于保持不变, 结果通常不是平滑的, 具有非连续性, 比如超音速问题
- ▶ Parabolic 抛物型: 是一种受限的双曲型, 是强度会具有耗散性的双曲型, 例如波动方程(wave equation)

问题类型	方程类型	方程原型	条件	解的空间	解的光滑性
均衡问题	椭圆型	$\nabla \cdot \nabla \phi = 0$	边界	封闭空间	光滑
无耗散的发展	双曲型	$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = c^2 \nabla \cdot \nabla \phi$	初始、边界	开放空间	可能非连续
有耗散的发展	抛物型	$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nu \nabla \cdot \nabla \phi$	初始、边界	开放空间	光滑



- ▶ 二阶PDE (2D):

$$a \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + b \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + d \frac{\partial \phi}{\partial x} + e \frac{\partial \phi}{\partial y} + f \phi + g = 0 \quad (46)$$

- ▶ 根据特征方程的根进行分类, 例如判别式 $b^2 - 4ac$:
 - $b^2 - 4ac < 0$: elliptic 椭圆型
 - $b^2 - 4ac = 0$: parabolic 抛物型
 - $b^2 - 4ac > 0$: hyperbolic 双曲型
- ▶ 如果 a, b, c 取决于 x, y , 那这方程可以称为“准线性” quasi-linear。



- ▶ “椭圆型、抛物型、双曲型”与圆锥曲线相对应
- ▶ 一个圆锥曲线的几何数学方程:

$$ax^2 + bxy + y^2 + dx + ey + f = 0 \quad (47)$$

- ▶ 根据特征方程的根进行分类, 例如判别式 $b^2 - 4ac$:
 - $b^2 - 4ac < 0$: 圆锥曲线是椭圆
 - $b^2 - 4ac = 0$: 圆锥曲线抛物线
 - $b^2 - 4ac > 0$: 圆锥曲线双曲线

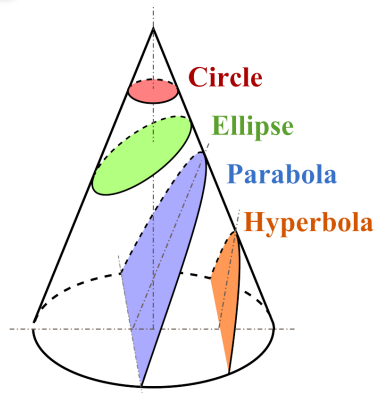


图: source: wikipedia.org

- ▶ “椭圆型、抛物型、双曲型”与圆锥曲线相对应
- ▶ 一个圆锥曲线的几何数学方程:

$$ax^2 + bxy + y^2 + dx + ey + f = 0 \quad (47)$$

- ▶ 根据特征方程的根进行分类, 例如判别式 $b^2 - 4ac$:
 - $b^2 - 4ac < 0$: 圆锥曲线是椭圆
 - $b^2 - 4ac = 0$: 圆锥曲线抛物线
 - $b^2 - 4ac > 0$: 圆锥曲线双曲线

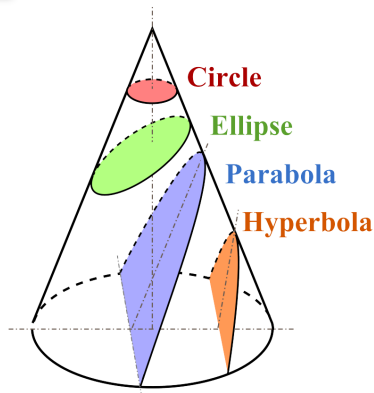


图: source: wikipedia.org

- ▶ “椭圆型、抛物型、双曲型”与圆锥曲线相对应
- ▶ 一个圆锥曲线的几何数学方程:

$$ax^2 + bxy + y^2 + dx + ey + f = 0 \quad (47)$$

- ▶ 根据特征方程的根进行分类, 例如判别式 $b^2 - 4ac$:
 - $b^2 - 4ac < 0$: 圆锥曲线是椭圆
 - $b^2 - 4ac = 0$: 圆锥曲线抛物线
 - $b^2 - 4ac > 0$: 圆锥曲线双曲线

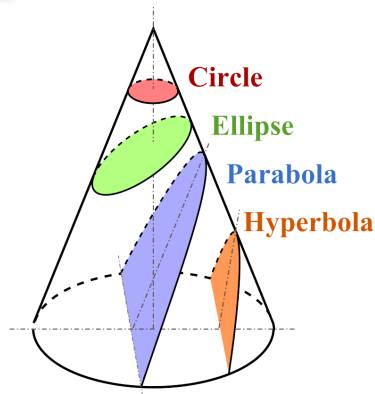


图: source: wikipedia.org

- ▶ 很多均衡性问题是稳态，没有时间偏导项($\partial/\partial t$)
- ▶ 例：稳定的潜流、稳态温度分布等
- ▶ 流体力学中潜流方程(potential flow equation)是一个重要的椭圆型方程，定义速度势能(velocity potential) ϕ 为 $\mathbf{u} = \nabla\phi$ 。对于不可压缩流动， $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ ，两个等式结合得到潜流方程：

$$\nabla^2\phi = 0 \quad (48)$$

同时也是拉普拉斯方程 the Laplace's equation

- ▶ 求解该问题只需要边界条件，不需要初始条件
- ▶ 主要特性：扰动是无限速度全方向展开，因此解是光滑的



- ▶ 很多均衡性问题是稳态，没有时间偏导项($\partial/\partial t$)
- ▶ 例：稳定的潜流、稳态温度分布等
- ▶ 流体力学中潜流方程(potential flow equation)是一个重要的椭圆型方程，定义速度势能(velocity potential) ϕ 为 $\mathbf{u} = \nabla\phi$ 。对于不可压缩流动， $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ ，两个等式结合得到潜流方程：

$$\nabla^2\phi = 0 \quad (48)$$

同时也是拉普拉斯方程 the Laplace's equation

- ▶ 求解该问题只需要边界条件，不需要初始条件
- ▶ 主要特性：扰动是无限速度全方向展开，因此解是光滑的



- ▶ 很多均衡性问题是稳态，没有时间偏导项($\partial/\partial t$)
- ▶ 例：稳定的潜流、稳态温度分布等
- ▶ 流体力学中潜流方程(potential flow equation)是一个重要的椭圆型方程，定义速度潜能(velocity potential) ϕ 为 $\mathbf{u} = \nabla\phi$ 。对于不可压缩流动， $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ ，两个等式结合得到潜流方程：

$$\nabla^2\phi = 0 \quad (48)$$

同时也是拉普拉斯方程 the Laplace's equation

- ▶ 求解该问题只需要边界条件，不需要初始条件
- ▶ 主要特性：扰动是无限速度全方向展开，因此解是光滑的



- ▶ 很多均衡性问题是稳态，没有时间偏导项($\partial/\partial t$)
- ▶ 例：稳定的潜流、稳态温度分布等
- ▶ 流体力学中潜流方程(potential flow equation)是一个重要的椭圆型方程，定义速度势能(velocity potential) ϕ 为 $\mathbf{u} = \nabla\phi$ 。对于不可压缩流动， $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ ，两个等式结合得到潜流方程：

$$\nabla^2\phi = 0 \quad (48)$$

同时也是拉普拉斯方程 the Laplace's equation

- ▶ 求解该问题只需要边界条件，不需要初始条件
- ▶ 主要特性：扰动是无限速度全方向展开，因此解是光滑的



- ▶ 很多均衡性问题是稳态，没有时间偏导项($\partial/\partial t$)
- ▶ 例：稳定的潜流、稳态温度分布等
- ▶ 流体力学中潜流方程(potential flow equation)是一个重要的椭圆型方程，定义速度势能(velocity potential) ϕ 为 $\mathbf{u} = \nabla\phi$ 。对于不可压缩流动， $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ ，两个等式结合得到潜流方程：

$$\nabla^2\phi = 0 \quad (48)$$

同时也是拉普拉斯方程 the Laplace's equation

- ▶ 求解该问题只需要边界条件，不需要初始条件
- ▶ 主要特性：扰动是无限速度全方向展开，因此解是光滑的



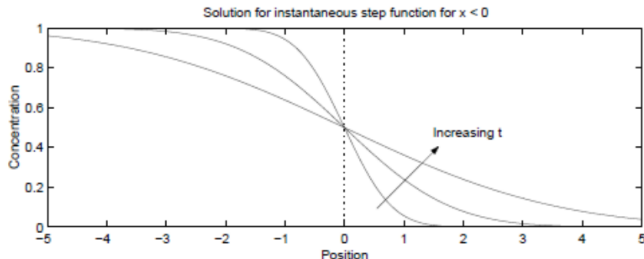
抛物型方程 Parabolic equations

32/39

- ▶ 具有耗散（扩散）的非稳态问题
- ▶ 例：非稳态的潜流、非稳态温度分布等
- ▶ 模型方程

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nu \nabla^2 \phi \quad (49)$$

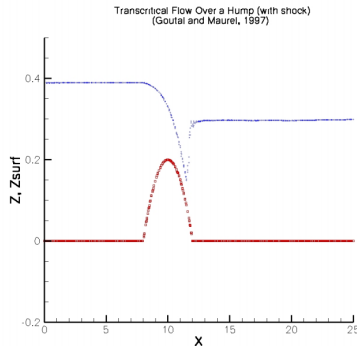
- ▶ 求解该问题同时需要边界条件和初始条件
- ▶ 主要特性：扰动只影响一段时间后的解，耗散（扩散）会使解趋向于光滑



- ▶ 忽略耗散（扩散）的非稳态问题
- ▶ 例：浅水方程、波动方程

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = c^2 \nabla^2 \phi \quad (50)$$

- ▶ 求解该问题同时需要边界条件和初始条件
- ▶ 主要特性：解可能存在不连续性，扰动具有波动性



图：绕凸包流动
flow over a hump

边界条件的作用

- ▶ 边界条件是用来限定解的，如果没有边界条件，解将会无穷多
- ▶ 边界位置和具体的条件设置需要一些工程经验判断，不恰当的边界条件会干扰求解或者造成“数值问题”，例如把出口边界设在有回旋流动的区域
- ▶ 边界条件的选择是基于对物理问题的系统性理解

数值问题中常见的边界条件

- ▶ Dirichlet B.C.(第一类边界条件): fixed boundary value of ϕ
- ▶ Neumann B.C.(第二类边界条件): zero gradient or no flux condition: $\mathbf{n} \cdot \vec{q}_s = 0$
- ▶ Fixed gradient or fixed flux condition: $\mathbf{n} \cdot \vec{q}_s = q_b$, Generalisation of the Neumann condition $\vec{q}_s = -\gamma \nabla \phi$
- ▶ Mixed condition: Linear combination of the value and gradient condition



边界条件的作用

- ▶ 边界条件是用来限定解的，如果没有边界条件，解将会无穷多
- ▶ 边界位置和具体的条件设置需要一些工程经验判断，不恰当的边界条件会干扰求解或者造成“数值问题”，例如把出口边界设在有回旋流动的区域
- ▶ 边界条件的选择是基于对物理问题的系统性理解

数值问题中常见的边界条件

- ▶ Dirichlet B.C.(第一类边界条件): fixed boundary value of ϕ
- ▶ Neumann B.C.(第二类边界条件): zero gradient or no flux condition: $\mathbf{n} \cdot \vec{q}_s = 0$
- ▶ Fixed gradient or fixed flux condition: $\mathbf{n} \cdot \vec{q}_s = q_b$, Generalisation of the Neumann condition $\vec{q}_s = -\gamma \nabla \phi$
- ▶ Mixed condition: Linear combination of the value and gradient condition



边界条件的作用

- ▶ 边界条件是用来限定解的，如果没有边界条件，解将会无穷多
- ▶ 边界位置和具体的条件设置需要一些工程经验判断，不恰当的边界条件会干扰求解或者造成“数值问题”，例如把出口边界设在有回旋流动的区域
- ▶ 边界条件的选择是基于对物理问题的系统性理解

数值问题中常见的边界条件

- ▶ Dirichlet B.C.(第一类边界条件): fixed boundary value of ϕ
- ▶ Neumann B.C.(第二类边界条件): zero gradient or no flux condition: $\mathbf{n} \cdot \vec{q}_s = 0$
- ▶ Fixed gradient or fixed flux condition: $\mathbf{n} \cdot \vec{q}_s = q_b$, Generalisation of the Neumann condition $\vec{q}_s = -\gamma \nabla \phi$
- ▶ Mixed condition: Linear combination of the value and gradient condition



边界条件的作用

- ▶ 边界条件是用来限定解的，如果没有边界条件，解将会无穷多
- ▶ 边界位置和具体的条件设置需要一些工程经验判断，不恰当的边界条件会干扰求解或者造成“数值问题”，例如把出口边界设在有回旋流动的区域
- ▶ 边界条件的选择是基于对物理问题的系统性理解

数值问题中常见的边界条件

- ▶ Dirichlet B.C.(第一类边界条件): fixed boundary value of ϕ
- ▶ Neumann B.C.(第二类边界条件): zero gradient or no flux condition: $\mathbf{n} \cdot \vec{q}_s = 0$
- ▶ Fixed gradient or fixed flux condition: $\mathbf{n} \cdot \vec{q}_s = q_b$, Generalisation of the Neumann condition $\vec{q}_s = -\gamma \nabla \phi$
- ▶ Mixed condition: Linear combination of the value and gradient condition



边界条件的作用

- ▶ 边界条件是用来限定解的，如果没有边界条件，解将会无穷多
- ▶ 边界位置和具体的条件设置需要一些工程经验判断，不恰当的边界条件会干扰求解或者造成“数值问题”，例如把出口边界设在有回旋流动的区域
- ▶ 边界条件的选择是基于对物理问题的系统性理解

数值问题中常见的边界条件

- ▶ Dirichlet B.C.(第一类边界条件): fixed boundary value of ϕ
- ▶ Neumann B.C.(第二类边界条件): zero gradient or no flux condition: $\mathbf{n} \cdot \vec{q}_s = 0$
- ▶ Fixed gradient or fixed flux condition: $\mathbf{n} \cdot \vec{q}_s = q_b$, Generalisation of the Neumann condition $\vec{q}_s = -\gamma \nabla \phi$
- ▶ Mixed condition: Linear combination of the value and gradient condition



- ▶ 循环边界条件(cyclic, periodic), 需要重复几何造型或者充分发展流动问题, 可以通过这个边界来减小计算域
- ▶ 为表示这种循环性(periodicity), 通常会设置一种 "自耦合" (self-coupled) 条件
- ▶ 特定情况下, 不是所有变量都设为循环边界, 比如充分发展流动中的压力项

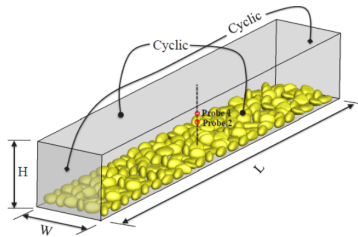


图: 充分发展明渠流动
fully developed channel flow

- For a passive transport (被动输运) of a scalar variable, physical meaning of the boundary condition is trivial (不重要). $\phi \neq \mathbf{u}$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) - \nabla \cdot (\lambda \nabla \phi) = \mathbf{S}_\phi \quad (51)$$

- In case of coupled equation sets or a clear physical meaning, it is useful to associate physically meaningful names to the sets of boundary conditions for individual equations. Examples:
 - stationary wall: no slip condition for velocity, $\mathbf{u} = 0$
 - moving wall: *movingWallVelocity*
 - Turbulent inlet: *turbulentInlet*
 - Slip: zeroGradient if ϕ is a scalar. If it is a vector, normal component is fixedValue zero, tangential components are zeroGradient

Most boundary conditions are implemented in

`$FOAM_SRC/finiteVolume/fields/fvPatchFields`



- ▶ For a passive transport (被动输运) of a scalar variable, physical meaning of the boundary condition is trivial (不重要). $\phi \neq \mathbf{u}$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) - \nabla \cdot (\lambda \nabla \phi) = \mathbf{S}_\phi \quad (51)$$

- ▶ In case of coupled equation sets or a clear physical meaning, it is useful to associate physically meaningful names to the sets of boundary conditions for individual equations. Examples:
 - stationary wall: no slip condition for velocity, $\mathbf{u} = 0$
 - moving wall: *movingWallVelocity*
 - Turbulent inlet: *turbulentInlet*
 - Slip: zeroGradient if ϕ is a scalar. If it is a vector, normal component is fixedValue zero, tangential components are zeroGradient

Most boundary conditions are implemented in

`$FOAM_SRC/finiteVolume/fields/fvPatchFields`



- ▶ For a passive transport (被动输运) of a scalar variable, physical meaning of the boundary condition is trivial (不重要). $\phi \neq \mathbf{u}$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) - \nabla \cdot (\lambda \nabla \phi) = \mathbf{S}_\phi \quad (51)$$

- ▶ In case of coupled equation sets or a clear physical meaning, it is useful to associate physically meaningful names to the sets of boundary conditions for individual equations. Examples:
 - stationary wall: no slip condition for velocity, $\mathbf{u} = 0$
 - moving wall: *movingWallVelocity*
 - Turbulent inlet: *turbulentInlet*
 - Slip: zeroGradient if ϕ is a scalar. If it is a vector, normal component is fixedValue zero, tangential components are zeroGradient

Most boundary conditions are implemented in

`$FOAM_SRC/finiteVolume/fields/fvPatchFields`



- ▶ Under-specification of B.C.s 容易出现唯一解 (unique solution)
- ▶ Over-specification of B.C.s 容易导致不合理的边界层

例如:

$$\frac{d^2 T}{dx^2} + T = 0 \quad (52)$$

上式的解取决于边界条件

1. $T(x=0) = 0, T(x=\frac{\pi}{2}) = 1$: 出现unique solution $T(x) = \sin(x)$
2. $T(x=0) = 0, T(x=\pi) = 1$: over determined, 无解
3. $T(x=0) = 0, T(x=\pi) = 0$: under determined, 无穷解, $T(x) = c \sin(x)$



- ▶ 初始条件是计算开始时各变量在计算域内的分布
- ▶ 有些情况，初始条件不重要，比如稳态计算
- ▶ 在很多情况下，初始条件非常重要

OpenFOAM® 中

- ▶ 均匀初始条件很好设置
- ▶ 非均匀初始条件需要用到 *setFields* 等工具，或者自己编程



- ▶ 初始条件是计算开始时各变量在计算域内的分布
- ▶ 有些情况，初始条件不重要，比如稳态计算
- ▶ 在很多情况下，初始条件非常重要

OpenFOAM® 中

- ▶ 均匀初始条件很好设置
- ▶ 非均匀初始条件需要用到 *setFields* 等工具，或者自己编程



Thank you.

欢迎私下交流，请勿上传网络，谢谢！

