**Обобщенная модель 1 вариант**

# 1 Модель

Уравнения

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (1.1) |
|  |  | (1.2) |
|  |  | (1.3) |
|  |  | (1.4) |

Дополнительные соотношения:

Остальные параметры: теплоемкость, теплопроводность и др. также могут быть функциями искомых полей.

Граничные условия я сейчас уточнять не буду.

# 2 Численный метод

## 2.1 Сетка, сеточные поля, операторы и обозначения

Далее все распределения теплофизических, механических и других параметров модели в пространстве в каждый момент времени будем называть полями. Поле , значения которого определены в центрах всех ячеек сетки, а также в центрах граней, лежащих на границе расчетной области, будем называть *объемным сеточным полем* или *объемным полем*. При записи значения объемного поля в центрах ячеек будем использовать заглавные буквы, например, объемное поле в ячейке – . Обозначим через – объем ячейки ; для равномерной сетки, в которой все объемы равны. Поле , значения которого определены в центрах граней конечных объемов рассматриваемой сетки, будем называть *поверхностным полем*. При записи значения поверхностного поля на гранях ячеек будем использовать малые буквы, например, объемное поле на грани – . Для удобства последующих записей введем следующие поверхностные поля. Через обозначим нормальный ориентационный вектор грани . Через обозначим площадь грани , т. е. . Ориентацию вектора определим следующим образом. Для пограничных граней вектор направлен вдоль внешней нормали к границе области. Для внутренних граней вектор направлен из ячейки с меньшим номером в ячейку с большим номером. На основе этого правила для каждой внутренней грани ячейку, имеющую меньший номер, будем называть *текущей* или *внутренней* и обозначать через , а ячейку, имеющую больший номер, будем называть *следующей* и обозначать через . Через обозначим вектор соединяющий центры ячейки с центром ячейки , расстояние между указанными ячейками обозначим через . Нам также для краткости понадобится единичный вектор . Через обозначим расстояние от центра грани до центра ячейки . Будем называть сетку ортогональной, если для каждой грани вектор и коллинеарны. Будем называть сетку равномерной, если для каждой грани расстояния одинаковы и равны . Через обозначим массовый поток текучей фазы через грань в направлении вектора :

Введенные понятия проиллюстрированы на рисунке 1.

Рисунок 1 Шаблон сетки

При описании разностных схем нам понадобятся операторы между объемными и поверхностными полями. Обозначим через

сумму значений поверхностного поля на гранях , принадлежащих некоторому множеству граней . Введем следующие множества граней:

*–* множество внутренних граней, ограничивающих ячейку , для которых эта ячейка является *текущей*.

– множество внутренних граней, ограничивающих ячейку , для которых эта ячейка является *следующей*.

– множества всех граней, окружающих ячейку .

На основе введенных множеств и операторов введем новый оператор :

где – поверхностное скалярное или векторное поле.

Приводимые ниже разностные схемы будут описываться в общем виде, справедливом как для изотропных, так и для неравномерных и неструктурированных сеток. Для удобства такого описания введем сквозную нумерацию отдельно для центров ячеек и отдельно для граней ячеек.

С помощью введенных только что операторов и множеств граней можно записывать дискретизированные аналоги интегралов от дивергенций, градиентов и других дифференциальных операций (см. Аппендикс А1) и записывать в общем и удобном виде разностные схемы для дифференциальных законов сохранения (см. Аппендикс А2).

Значение поля на предыдущем относительно рассматриваемого шаге по времени будем обозначать верхним индексом , рассматриваемый шаг по времени будем обозначать через . Внутри каждого временного слоя решение задачи в общем случае будем искать в итерационном процессе, который будет описан ниже, поэтому значение поля на предыдущей итерации будем обозначать верхним индексом , а на текущей итерации – верхним индексом .

## 2.2 Разностные схемы для уравнений энергии фаз

Далее положим, что сетка статична, то есть не меняется от одного временного слоя к другому. Разностные схемы, аппроксимирующие уравнения (1.1) – (1.4) получаются путем интегрирования их по объему в каждой ячейке сетки. При этом, например, в уравнении (1.1) левая часть и первое, третье слагаемые правой части интегрируются «напрямую», и интегралы заменяются произведением объема ячейки на значение величины в ее центре. Второе слагаемое преобразуется по теореме Гаусса в интеграл от потока величины, находящейся под оператором в направлении внешней нормали к ячейке. Этот интеграл разбивается на сумму интегралов на каждой грани ячейки, а последние заменяются потоком указанной величины в направлении вектора . После такой дискретизации разностную схему для уравнения энергии твердой фазы можем записать в следующем виде

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (2.1) |

Опишем подробнее коэффициенты , , , уравнения (2.1). В общем случае эти коэффициенты определяются следующим образом:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (2.2) |
|  |  | (2.3) |
|  |  | (2.4) |

где величина на грани ячейки получена путем интерполяции ее значений из центров близлежащих ячеек.

В соотношении (2.4) последнее слагаемое правой части, так же, как и скалярные произведения векторов и в последних слагаемых правых частей (2.2), (2.3) обусловлены аппроксимацией градиентов на гранях ячеек [Моуколд]. Под обозначением понимается значение вектора градиента поля на грани , полученное интерполяцией значений градиента в центрах ячеек . Поле в ячейке здесь и далее будем вычислять по формуле

где значения поля на гранях ячеек вычисляются интерполяцией из центров ячеек. Далее при вычислении градиентов в центрах ячеек будем использовать линейную интерполяцию.

Для ортогональной сетки, когда совпадают направления векторов и , последнее слагаемое в (2.4) равно нулю, а скалярное произведение векторов и равно площади грани . Поэтому для наглядности приведем вид коэффициентов , , , для случая равномерной ортогональной сетки и постоянных коэффициентов , :

Для краткости для излагаемых ниже разностных уравнений вид коэффициентов будем также приводить для случая равномерной сетки при постоянных параметрах системы уравнений (1.1) – (1.4). Более общий вид коэффициентов может быть получен по аналогии с показанным выше.

Уравнение энергии газа дискретизируется аналогично (2.1) и выглядит следующим образом

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (2.5) |

Вид коэффициентов разностного уравнения (3) зависит не только от сетки, но и от способа интерполяции конвективного потока величины через грани ячеек. Этот поток заранее неизвестен и должен быть интерполирован на основе значений в центрах ячеек сетки. Поэтому для наглядности приведем вид этих коэффициентов для случаев, когда этот поток интерполируется линейно и по противопоточной схеме. Для обоих случаев коэффициент определяется следующим образом:

Коэффициенты , , при линейной интерполяции определяются следующим образом:

что соответствует центрально-разностной аппроксимации второго порядка. В случае противопоточной аппроксимации:

что соответствует двухточечной противопоточной аппроксимации первого порядка. – функция Хэвисайда. При линейно-противопоточной интерполяции [Warming]:

## 2.2 Разностные схемы для уравнений импульса и неразрывности текучей фазы

Перейдем к получению разностных схем для вычисления скорости и давления текучей фазы, а также для вычисления ее массовых потоков через грани ячеек. Указанные величины будем искать на основе алгоритма SIMPLE [Патанкар], точнее – т. н. алгоритма PIMPLE [Holzmann], который совмещает идеи SIMPLE и PISO [Issa]. Основная задача алгоритма состоит в том, чтобы на шаге по времени найти такие поля , , , которые точно удовлетворяют следующим дискретизированным законам сохранения импульса и массы в каждом конечной объеме:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (2.6) |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (2.7) |

Коэффициенты уравнения (2.6) также получаются в результате интегрирования уравнения сохранения импульса по конечному объему. Аналогично случаю уравнения (2.5), коэффициенты схемы (2.6) зависят от аппроксимации потоков величины через грани ячеек. Для краткости и наглядности приведем вид этих коэффициентов в случае линейной интерполяции:

Введем операторы

и перепишем схему (2.6) в следующем виде:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (2.8) |

Пусть перед вычислением мы хотим найти промежуточное поле , которое удовлетворяет следующему уравнению:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (2.9) |

Как показано в [Патанкар, Моуколд], при интегрировании законов сохранения импульса и массы в конечных объемах одной и той же сетки для вычисления потоков на гранях приходится прибегать к интерполяции значений и из центров ячеек. Это может приводить к ошибке «зигзагообразных» решений. Избежать эту ошибку можно, если из уравнения сохранения импульса сразу вычислять потоки жидкости через грани ячеек. Это можно сделать, если составить аналог уравнения (2.9) в объеме, центрированном относительно центра грани :

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (2.10) |

Поля и в общем случае невозможно вычислить напрямую, поэтому они должны быть вычислены интерполяцией из центров ячеек сетки [Моуколд]. Теперь умножим обе части уравнения (2.10) скалярно на вектор . В этом случае получим:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (2.11) |

где за обозначен массовый поток вектора через грани ячеек. Величина также вычисляется интерполяцией. Пусть новые поля , и вычисляется путем прибавления к предыдущим полям соответствующих поправок , и :

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (2.12) |
|  |  | (2.13) |
|  |  | (2.14) |

Подставив (2.12) и (2.13) в (2.6) с учетом (2.9), получим, что и удовлетворяют следующему уравнению:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (2.15) |

По аналогии с (2.10) и (2.11) уравнение (2.15) можем интерполировать на грани ячеек и получить соотношение для массового потока через грани ячеек:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (2.16) |

Подставив (2.11) и (2.16) в (2.14) и используя (2.12), получим, что искомый массовый поток на каждой грани удовлетворяет следующему уравнению:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (2.17) |

Рассмотрим более подробно вектор в (2.17). В [Патанкар] показано, что если «правильные» поля и найдены, то , так как равны нулю и . Следовательно, этот член не влияет на финальное решение, и его можно опустить. В этом случае уравнение (2.17) преобразуется к следующей явной схеме:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (2.18) |

Аналогичным путем получим явное уравнение для **:**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (2.19) |

Массовый поток , находимый из уравнения (2.18), должен в каждой ячейке удовлетворять закону сохранения массы (2.7). Подставив (2.18) в (2.6), получим уравнение, из которого можно найти такое поле давления , что при его подстановке в (2.18) получим такое поле потока , которое будет удовлетворять (2.6):

или

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (2.20) |

На каждой грани нормальный градиент давления выражается через значения давления в ячейках, соединяемых этой гранью согласно [Моуколд] по аналогии с уравнением (2.1). В частности, на ортогональной равномерной сетке величина выражается следующим образом:

После подстановки этих выражений в (2.20) получим разностную схему, связывающую значения давления в центре ячейки с центрами соседних ячеек:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (2.21) |

где коэффициенты , , , на равномерной ортогональной сетке выглядят следующим образом:

Итак, в итоге имеем следующую систему конечно-разностных уравнений:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (2.22) |
|  |  | (2.23) |
|  |  | (2.24) |
|  |  | (2.25) |
|  |  | (2.26) |

**Учет краевых условий**

Приведенные примеры выражений для коэффициентов уравнений (2.22) – (2.26), а также их обобщения справедливы только для ячеек, грани которых *не лежат* на границе расчетной области. Рассмотрим теперь кратко, как меняются эти коэффициенты в ячейках, грани которых лежат на границе расчетной области, а также вычисление значений искомых полей на таких гранях.

**Уравнение энергии твердой фазы**

Для уравнения энергии твердой фазы в настоящей работе мы рассматриваем только условия заданного нормального градиента на всех границах объекта. Обозначим через множество граней ячейки , лежащих на границе, где задан нулевой нормальный градиент. В этом случае множества в (2.22) и в определении коэффициента заменяются на и соответственно. После решения уравнения (2.22) и нахождения поля во всех центрах ячеек значения его на гранях, лежащих на границе объекта, для ортогональной сетки вычисляются следующим образом:

**Уравнение энергии текучей фазы**

Для уравнения энергии текучей фазы есть границы, где задан нулевой нормальный градиент и где задано значение температуры текучей фазы. Первый случай обрабатывается аналогично описанному для уравнения энергии твердой фазы. Чтобы разобраться со вторым случаем, рассмотрим интегрирование уравнения (1.2) по объему , соединяющимся с границей, где задано значение температуры текучей фазы, а именно ту его часть, которая обусловлена притоком тепла за счет теплопроводности и конвекции:

где – вся поверхность объема . Заметим, что зная температуру и теплоемкость текучей фазы можем вычислить и значение энтальпии на границе, которое обозначим . Обозначим множество граней, где задано значение через и рассмотрим сумму потоков только на этих гранях:

Таким образом, в разностную схему (2.23) вносятся следующие изменения. В уравнении (2.23) множество заменяется на , а коэффициенты и выражаются в случае противоточной интерполяции следующим образом:

где учтено, что на равномерной ортогональной сетке . После решения уравнения (2.23) значения поля на гранях, где задано значение поля, приравниваются к .

**Уравнение для давления**

В случае, когда часть граней окружающих ячейку лежит на той части границе расчетной области, где задано давление текучей фазы, выражения коэффициентов и изменяются аналогично описанному выше для уравнения движения газа. Особого рассмотрения заслуживают случаи, когда заданы параметры нормального потока на границах: заданный массовый или объемный расход, условия непротекания и т. д. Из таких условий в настоящей работе рассматривается только случай равенства нулю нормального потока на непроницаемых стенках. Поэтому опишем видоизменение разностной схемы (2.24) для этого случая. Из условия равенства нулю потока на непроницаемых границах, следует . Тогда из (2.18) следует равенство

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (2.27) |

Из (2.27) следует, что в (2.20) соответствующие слагаемые в операторе просто сократятся и не будут участвовать в этом уравнении. После нахождения значений давления в ячейках сетки, его значения на таких гранях определяются из (2.27) с использованием аппроксимации градиента:

**Уравнение движения текучей фазы**

Для разрешимости разностной схемы (2.24) необходима разрешимость и разностной схемы (2.6), хотя последняя и не решается непосредственно. Поэтому в процессе вычислений на скорость ставится искусственное условие нулевого нормального градиента на границах, где задано давление текучей фазы. Это условие не изменяет формальную точность метода.

**Релаксация конечно-разностных уравнений и сеточных полей**

Использование неявных разностных схем для дифференциальных уравнений сводится к решению СЛАУ. При этом наличие значительного влияния конвективного слагаемого, как в уравнении энергии газа, или наличие сильных нелинейностей может приводить к нарушению условия диагонального преобладания [Рябенький], которое в случае разностной схемы вида

имеет вид

В этом случае проводят релаксацию уравнений. Релаксация уравнений сводится к тому, что вместо исходной разностной схемы решается следующая:

где – искомое сеточное поле, – коэффициент релаксации. Эквивалентом будет сказать, что релаксация разностной схемы, состоит в том, что коэффициенты и перед решением СЛАУ корректируются следующим образом:

В конце каждой итерации после решения разностной схемы, мы вычисляем норму невязки, подставляя «текущее» решение, то есть , в разностную схему:

Эта невязка совпадет с невязкой для нерелаксированной разностной схемы. Если после получения решения на итерации невязка оказывается меньше заданного малого числа, то мы считаем, что мы достигли решения исходной разностной схемы.

Под релаксацией поля , для которого известны значение на двух соседних итерациях и , будем понимать коррекцию этого поля следующим образом:

**Определение температур фаз**

Решением уравнений (2.22) и (2.23) являются объемные поля и . Чтобы определить температуры фаз и нужно использовать известные функциональные зависимости, а именно – решить уравнения вида

в каждой ячейке сетки. Зная, что , уравнения для нахождения и можем решить итерационным методом Ньютона:

Эти итерации продолжаются, пока величина разницы между только что вычисленной температурой и температурой с предыдущей итерации не станет меньше заданной точности, однако, в случае , , который рассматривается в настоящей работе, формулы () сходятся к точным значениям за одну итерацию.

**Алгоритм нахождения искомых функций**

Пусть нам известны значения всех искомых функций на временном слое с номером . Чтобы найти значения искомых функций на временном слое , выполняем следующие шаги.

**Шаг 0.** В качестве начальных приближений на первой итерации для всех искомых полей берем их значения с временного слоя .

**Шаг 1.**

1. Вычисляем все параметры системы (1), зависящие от искомых функций, при значениях последних на итерации .
2. Вычисляем коэффициенты , , , для уравнений (2.22) и (2.23).
3. При необходимости релаксируем матрицы.
4. Решаем уравнения (2.22) и (2.23) и находим поля и . Вычисляем значения и на гранях, лежащих на границе расчетной области.
5. Находим поля и в ячейках и на границе области.

**Шаг 2.**

1. Вычисляем параметры , , и для уравнения (2.7)
2. При необходимости релаксируем снизу коэффициенты , .
3. Формируем оператор .
4. Полагаем .

**Шаг 3.**

1. Вычисляем вектор и его массовый поток .
2. Решаем уравнение (2.24) и находим поле . Если сетка неортогональная, то этот пункт следует повторить 1–2 раза.
3. При необходимости релаксируем поле давления.
4. Вычисляем массовый поток через грани ячеек сетки из уравнения (2.25).
5. Вычисляем вектор скорости газа из уравнения (2.26). Вычисляем на границе расчетной области.
6. Вычисляем плотность .
7. Если этот шаг нужно повторить, то и возвращаемся к пункту 1. Иначе переходим к следующему шагу.

**Шаг 4.** Если не достигнута заданная точность или заданное число раз, то возвращаемся к шагу 1, взяв в качестве значений полей на итерации их только что найденные значения с индексом . Иначе, если не достигнут требуемый момент времени, значения функций с индексом берем в качестве их значений на рассчитываемом временном слое , переходим к следующему временному слою и на новом временном слое начинаем процесс с шага 0. Если достигнут конечный момент времени, то вычисления заканчиваются.

**Ссылки**

1. Moukalled F., Mangani L., Darwish M. The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics. An Advanced Introduction with OpenFOAM® and Matlab®. Cham: Springer. 791 p.
2. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости: Пер. с англ. М.: Энергоатомиздат, 1984. 152 с.

# 2 Аппендикс А1

Пусть известно скалярное поле на гранях ячеек сетки, и пусть мы знаем, что значение на грани имеет смысл потока вектора через эту грань в направлении вектора . Другими словами, если вектор постоянен на грани , то

По теореме Гаусса дивергенция вектора в объеме ячейки удовлетворяет соотношению

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (A1.1) |

где – поверхность ячейки , – внешний вектор площади поверхности. Положим, что поверхность ячейки состоит из совокупности более простых поверхностей, или граней, – например, плоскостей в трехмерной случае – и представим интеграл правой части (A1.1) в виде суммы интегралов:

Далее положим, что в пределах каждой грани изменения функции малы, и поэтому ее можно считать постоянной. Тогда интеграл на каждой грани заменится произведением этого значения на внешний вектор площади грани:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (A1.2) |

где – вектор площади грани , направленный вдоль внешней нормали к поверхности ячейки , – значение на грани . Вектор неудобен для использования, так как помимо грани его направление определяется еще и ячейкой . При описании численных методов удобнее использовать глобальный вектор , который зависит только от грани . Вектор , как и вектор , всегда направлен по нормали к поверхности , однако, в отличие от , он не всегда направлен вдоль внешней нормали по отношению к рассматриваемой ячейке . Поэтому в (А1.2) невозможно просто заменить на . Тем не менее переписать (A1.2) через можно, если привлечь понятия внутренней и внешней ячеек для поверхности . По определению вектор на поверхности направлен от внутренней к внешней ячейке. Следовательно, на тех поверхностях, для которых ячейка является внутренней, вектор направлен вдоль внешней нормали, то есть вовне ячейки . Поэтому поток вдоль внешней нормали к ячейке через такую грань равен . На тех поверхностях, для которых ячейка является внешней, вектор направлен вдоль вовнутрь ячейки . Поэтому поток вдоль внешней нормали к ячейке через такую грань равен . Таким образом, использую множества и , можем (A1.2) переписать следующим образом:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (A1.3) |

Теперь вспомнив определение скалярной поверхностной величины , можем переписать (A1.3) в следующем виде:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (A1.4) |

Теперь положим, что интеграл некоторой величины по малому конечному объему также можно заменить интегралом от некоторого постоянного значения этой величины. Тогда окончательно получим следующую общую схему для аппроксимации дивергенции:

# 2 Аппендикс А2

Рассмотрим уравнение Пуассона:

Проинтегрируем его по объему с поверхностью :

Согласно Аппендиксу 1 интеграл в левой части дискретизируется следующим образом:

Распишем теперь этот интеграл для равномерной ортогональной сетки:

Подставим полученное в левую часть интегрального уравнения:

Введем следующие объемные и поверхностные поля:

Теперь разностную схему можно записать в следующем виде:

Из последней записи видно, что поля , , имеют смысл диагональных, поддиагональных и наддиагональных коэффициентов матрицы СЛАУ, получающейся при решении разностной схемы, соответственно.