无痛苦N-S方程笔记

An Introduction of The Navier-Stokes Equation Without Pain

Dongyue Li 李东岳

$$A = R^{-1} \Lambda R$$



裂痕是什么 那是阳光照进来的地方 前言 CFD 糅合物理、数值方法和计算机科学于一体,用于模拟流动状态。早期工作可追溯到 1917年,Lewis Richardson 尝试手算偏微分方程组来预测天气预报。1943年,Los Alamos 实验室,意图通过求解偏微分方程来预测飞行器的激波位置并用于军事行动。这被认为是 CFD 的雏形。当时,CFD 被 Los Alamos 实验室当做一种机密黑科技。到了 70年代,得益于计算机技术的高速发展,CFD 被大量地应用于航空航天的流场模拟中。在航空行业的大力支持下,大量的湍流模型顺势而生。从某种程度上说,早期 CFD 的发展和计算机的发展直接相关。多亏大型计算集群,1980年代,已经有了计算二维势流和三维欧拉方程的能力。随后,一些加速数值算法也被提出,如多重网格技术 [8]。80年代中后期,CFD 已经可以用于求解粘性 N-S 方程。与此同时,大量的涡粘模型被提出。随后,直接模拟(Direct Numerical Simulation,DNS)以及大涡模拟(Large Eddy Simulation,LES)成为了 CFD 中一种解析度非常高的模拟技术。今天,连智能手机都配备了 8G 内存,4 核心的处理器几乎成为最低配置,甚至有人用手机进行小型的 CFD 计算。2020年,计算机算力大大提升。CFD 与各个领域相结合,成为了一种辅助工程设计的技术。学术界,CFD 也与各种学科相互交叉,研究成果日新月异,层出不穷。呈现一种蓬勃发展的态势。

在这里,有必要区分一下流体力学与 CFD。二者之间存在不可割舍的联系,但差异也非常明显。从 CFD 的名字上来理解, Computational 译为"计算"。Fluid Dynamics 则为流体动力学。因此 CFD 即为计算流体力学。流体力学着重研究如何构建偏微分方程, CFD 着重研究如何计算偏微分方程。因此, CFD 也可以理解为首先通过流体力学研究构建对应的数学模型,然后通过数值方法对模型进行求解的过程。流体力学侧重建模, CFD 侧重数值求解。没有流体力学构建的模型 CFD 无用武之地,流体力学构建模型之后没有 CFD 则不可能获得解。举例,多相流体力学的研究者可能对两个气泡之间如何破碎感兴趣,因此这些研究学者的工作可能是通过实验监控气泡周围的流场数据(如湍流动能),构建一个破碎频率关于湍流动能的关系式。多相计算流体力学的研究者在拿到这个关系式之后,需要用数值方法去对其进行求解。另一方面,流体力学研究者离不开实验,CFD 研究者可以无实验进行研究。流体力学的顶级期刊是 Journal of Fluid Mechanics 等,CFD 的顶级期刊是 Journal of Computational Physics等。流体力学与 CFD,也存在一种所属关系。CFD 属于流体力学研究,但不能认为流体力学研究就是 CFD。同时,Journal of Fluid Mechanics 经常会看到偏 CFD 的研究。但 Journal of Computational Physics 上流体力学的研究要少的多。所以,CFD 应该属于流体力学研究的一个小类。正如 Ferziger 等人所说 [12]:

"CFD 可以看做是流体力学或者数值算法的一个分支。CFD 从业者需要在这俩方面具备牢固的背景知识。如果偏科,很有可能会得到错误的模拟结果。我们希望读者能重视这一点,并学习相关的知识。"

在生活中,流体的流动也吸引了科学家广泛的关注并进行了深入的研究。Bourouiba 等针对人们打喷嚏的现象,详细的研究了喷嚏液滴的流动状态,得出喷嚏飞沫可以漂浮 8 米远的结论,在 2020 年的新冠疫情中,对普通百姓防疫起了重要作用。Gillespie and Hamilton对一种烤肉架进行 CFD 模拟分析,认为经过 CFD 优化后的烤肉架炙烤后的菜品更加美味并申请了美国专利。Centaur 公司通过将 CFD 温控技术加入粮食储备系统,可以实时监控粮食仓储系统的温湿度,防止粮食变质,并拿下 3000 万人民币的融资。著名卫浴领导品牌Roca,为了提升马桶的用户体验,通过 CFD 对马桶进行了模拟,研究了水管的形状、弯度、管道直径、需水量等影响因素对流体流动的影响。此外,CFD 在汽车领域的研究已属家常便饭,蔚来、比亚迪汉、甚至宾利都通过 CFD 来对新能源汽车进行设计,力图减少风阻增加续航。Wallevik 等采用开源 CFD 软件,通过两相流模型,研究混凝土搅拌车的搅拌效果。除了地上跑

的汽车,美国宇航局甚至用自编 CFD 代码研究太空飞的陨石,力图降低陨石在高空爆炸引起的危害。 更为新奇的,有人用 CFD 的方法研究精子运动与人类受孕,研究喷墨打印机的喷口流动,Rabino甚至 用 CFD 商业软件来分析女性平胸与巨乳的阻力系数,得到了一些令人瞠目结舌的结果。

总而言之,CFD 已经成为了一个上可飞天,下可落地的技术。各个行业的工程师,但凡涉及到流体的学问,必然都会诉求 CFD 来解决实际问题。然而,CFD 并不像 word 软件,拿来就能用,随便就能学。大量的从业者表示,CFD 学习的曲线非常陡峭。商业软件的 CFD 学习尚且相对容易。开源软件的 CFD 学习,以及 CFD 算法的学习,则是难上加难。但是,要将 CFD 学成真本领,还真得从算法出发,上升至应用,才能将 CFD 真正掌握,玩弄于掌股。同时,商业 CFD 软件与自编 CFD 软件基本上是两条路。商业软件侧重 CFD 应用,自编/开源 CFD 软件侧重算法开发。我国数值传热学泰斗、中国科学院院士陶文铨教授,曾为宇波教授等人著作的《数值传热学实训》做序,其中写道 [25]:

"如果我们培养的大学生甚至研究生,只会使用商业软件,而不会开发自己的,特别考虑到目前广为使用的商业软件均是国外的产品,那么多年后我们国家的工程技术和研究人员的开发水平会是什么样子?不堪想象!"

2019 年起,中美贸易摩擦频繁发生,除了百姓的必需品大豆之外,连芯片及工业软件(如 MATLAB),均被限制出口。华为、中兴的业务惨遭锁喉。以计算机芯片为例,国外的芯片设备商掌握了复杂的芯片制造工艺,随着工艺越来越高精尖,芯片设备商的话语权一步一步的提升。因此,在过去的长达几十年里,美国一直以各种手段,保证掌控芯片制作工艺,保证自己在设备领域的绝对领导地位。在美国贸易霸权之下,2020 年 8 月 7 日,华为余承东公开表示,因为美国的禁令,台积电不再为华为代工,华为的海思麒麟芯片将绝版。

类似于芯片, CFD 软件, 作为 CAE 大系中的一个小类, 一直都是中国卡脖子的技术难点。国外的开源软件 OpenFOAM, 用了 40 年的时间发展到了今天。中国的 CFD 大牛并不少, 甚至涌现出很多世界一流的 CFD 研究学者, 在这些学者的领导下, 出现了一些 in-house 的 CFD 求解器。另一方面, 很多优秀的普适性 CFD 求解器甚至都开源了。但是为什么中国做不出一个类似 OpenFOAM 的强大的普适性 CFD 求解器。这与我们如何看待知识产权的态度、如何评价科研成果等有直接关系。要做中国自主的 CFD 软件, 需要 5 年、10 年, 甚至几代人的努力。任正非曾经感叹:

"我们国家修桥、修路、修房子,已经习惯了砸钱就行。但是芯片砸钱不行,得砸数学家、物理学家、化学家。"

因此,如果这份笔记,能让我国的 CFD 人才少走弯路,或激发相关人员研究 CFD 的兴趣,也算作为一个 CFD 从业者,为我国整个 CFD 行业应尽的一份责任¹。

¹本笔记最初是为参加东岳流体 GCFD 课程的同学准备的预习资料。目前已经演变成一本初级的 CFD 人门材料。非常适用于无 CFD 基础的初学者。注意是无 CFD 基础而不是 CFD 基础薄弱。同学们只要懂高等数学,直接学习本笔记即可。

致谢 本笔记为李东岳博士讲授的 General CFD 课程参考资料。作者水平有限,一直对算法保持敬畏。本笔记难免有不妥和错误之处,敬请各位老师同学指正。本笔记采用 LFTEX 制作。勘误、增补等可前往CFD 中文网讨论,或邮件联系: li.dy@dyfluid.com

时间戳 电子版首发于 2019 年 2 月 14 日,最新修订于 2020 年 11 月 19 日



勘误:

190607汪洋

190705 陈佳 增加脚注 3

190619谢鹏 修正一些笔误

190610 沈学峰 流畅更正为流场

190504Frank0514 修正一些笔误

190610刘威 修正 8 个问题

190314 原加 修正交叉引用方程

190222 金国庆 (2.31)左侧第二项 $\frac{\partial}{\partial t}$ 修正为

修正若干错误

 $\frac{\partial}{\partial x}$

191023 蔡欣 方程(3.78)下标

191204 梁钢 方程(3.45)、(3.46)、(3.47)

191221 陈东林 速度散度中体积修正为单位

体积

200207 **E**文洋 增加方程(4.60)中的 Δx

200207 李东岳 更正4.12节中 dev 函数

200318 赵鹏 更正方程(4.67)的索引

200326周佳其 一些评论

200716Yongbo 更正方程索引

200826 姚卫 更正方程(3.80)的 k 项

200829 王飞 方程(3.93)遗漏 dx

目录

第一章	不只是 N-S 方程	1
第二章	方程标识	3
2.1	矢量标识法	3
2.2	张量标识法	4
2.3	偏导标识法	6
2.4	运算符标识法	7
第三章	流体与 N-S 方程	9
3.1	- <mark>导论</mark>	9
3.2	泰勒公式	10
3.3	流动模型	11
	3.3.1 有限控制体模型	11
	3.3.2 无穷小微团模型	12
	3.3.3 物质导数	12
3.4	连续性方程	14
	3.4.1 微分形式	15
	3.4.2 积分形式	17
	3.4.3 通量与速度散度的物理意义	18
	3.4.4 拉格朗日观点	20
	3.4.5 连续性方程小结	21
3.5	动量方程	22
	3.5.1 受力分析	22
	3.5.2 动量守恒	25
	3.5.3 守恒/非守恒转化	25
	3.5.4 封闭	26
	3.5.5 积分观点	28
3.6	学习要求与思考	29
第四章	拓展内容	31
4.1	湍流	31

VIII	目录
VIII	目录

	4.1.1 直接模拟	32
	4.1.2 大涡模拟	32
	4.1.3 雷诺平均以及其他	33
	4.1.4 二维直接模拟/大涡模拟	34
4.2	结构网格与非结构网格的区别	35
	4.2.1 非结构网格通量计算	36
	4.2.2 非结构网格 TVD 格式范例	37
4.3	为什么 $-\frac{2}{3}\mu(\nabla\cdot\mathbf{U})\mathbf{I}$ 为体膨胀系数项?	38
4.4	什么是应力的 Deviatoric 与 Hydrostatic 部分?	38
4.5	如何理解雷诺应力项中的 $\frac{2}{3}\rho k$ I?	39
4.6	变量有界性	40
4.7	守恒与非守恒、守恒变量与原始变量	41
4.8	动理学方程、矩方程与 N-S 方程	42
4.9	Jacobian	43
4.10	非牛顿流体	44
4.11	算子分裂法	44
4.12	$laplacian(\phi) = div(grad(\phi))? \dots $	45
4.13	$-fvc::flux(-phir,) = fvc::flux(phir,)? \dots \dots$	46
4.14	pEqn.flux()?	47
4.15	fvc::reconstruct()?	47
4.16	OpenFOAM 中的边界条件	48
附录:(OpenFOAM 模型速查	53
补充资料		63

第一章 不只是 N-S 方程

谈到 CFD, 大部分人最开始想到的就是 Navier-Stokes 方程 (N-S 方程)。N-S 方程从守恒定律推导而来:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0, \tag{1}$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau, \tag{2}$$

其中 ρ 为密度, U 为速度, p 为压力, ν 为粘度, τ 为剪切应力。N-S 方程具有以下特点:

- 方程(2)中左边第二项是关于 U 乘积的偏导数,这种未知量和未知量乘积的问题构成非线性问题, CFD 对非线性问题需要特殊处理。另一方面,非线性的双曲问题的解可能会存在间断(如激波)。 激波通常存在于高超声速的欧拉问题求解中。同时,非线性项也是湍流在数学方程中的体现;
- 方程(2)的数学特征为抛物线。不同数学特征的问题需要调用不同的时间/空间离散格式,隐性时间格式更有利于求解抛物线问题。若方程(2)中省略若干项则会改变方程的数学特征,例如若将方程右侧置为 0,则变为双曲特征的欧拉方程。欧拉方程得益于其双曲特性,可采用迎风类显性算法推进,各种基于有限体积法的高分辨率格式因此而生(交错网格中心格式、中心-迎风格式等)。同时,动量方程的对流项、和扩散项的相对强弱,也会影响边界条件的设置(如 DNS 的出口无反射边界条件);
- 在马赫数较大时(如大于 0.3),方程(1)可用来求解密度,方程(2)可用来求解速度,同时附加能量方程求解温度以及状态方程求解压力,即密度基求解器。在马赫数较小时,并没有单独的压力方程,并且方程(1)缺少主要求解变量。这导致压力的求解需要特殊的策略。这也是 CFD 中压力基 SIMPLE/PISO 算法要处理的问题。在构建离散矩阵的情况下,对速度和压力整合处理还是单独处理,是分离求解与耦合算法的重要问题;
- N-S 方程之前传: N-S 方程为宏观方程,调用了宏观假定,其可从玻尔兹曼方程附加 Chapman-Enskog 展开推导而来。N-S 方程也可以看做从介尺度模型演化的宏观二阶矩模型。在无压力无粘性的条件下具备弱双曲特征。由于失去了高阶矩的统计学特征,因此 N-S 方程在某些情况下是不适用的,比如稀薄流、微流动、以及气固多相流中的颗粒轨迹交叉现象都不能用 N-S 方程来描述。其数学本源在于 N-S 方程假定流体为一种均衡状态,在某一个网格点存在一个单值的分布。然而,在分子/颗粒数量非常小的情况下,这些分子/颗粒基本无碰撞,会导致多值问题的产生。因此,在这种情况下,需要对统计学分布的高阶矩进行追踪,N-S 方程作为二阶矩模型是往往不够的。

正如上面讨论的,N-S 方程中存在大量的数学问题,初学者也不看的不明不白。这无关紧要。本章 仅仅抛出一块砖头,让大家了解隐藏在 CFD 中的方程的美妙含义。这些方程中充满火星符号(如 ∇ ,

 ∂),也让人摸不清头脑。GCFD 课程因此分为两步,第一步是基本的 N-S 方程入门,第二部是 N-S 方程求解。第一步需要同学们通过本笔记进行预习。第二部将在 GCFD 课程上讲授。

第二章 方程标识

学习 CFD 理论首先遇到的就是各种各样的偏微分算符。能看懂、拆分 CFD 方程是研究算法的最基本步骤。给出一个 CFD 方程(如动量方程),可以不知道是怎么推出来的,但要能看懂。本章介绍 CFD 方程的各种写法,不涉及到任何的 CFD 算法。

2.1 矢量标识法

本笔记中主要采用矢量标识法讨论 CFD 方程,在矢量标识法中,标量全部采用斜体,如压力 p。 矢量采用正体加粗,如速度矢量 \mathbf{U} ,其具有三个分量 u_1 , u_2 , u_3 或 u, v, w。二阶张量也采用正体 \mathbf{I} ,比如应力张量 $\boldsymbol{\tau}$,其具备 9 个分量,其可表示为:

$$\boldsymbol{\tau} = \begin{bmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} & \tau_{13} \\ \tau_{21} & \tau_{22} & \tau_{23} \\ \tau_{31} & \tau_{32} & \tau_{33} \end{bmatrix}$$
 (2.1)

下面粘度 ν 为 1 的不可压缩流体动量方程为例对其进行拆分,这个方程若采用矢量标识法可以写为:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}\mathbf{U}) = -\nabla \frac{p}{\rho} + \nabla \cdot (\nabla \mathbf{U})$$
 (2.2)

其中的 U 为速度矢量,p 为压力, ρ 为密度。一般来讲,CFD 文献中通常采用方程(2.2)的形式,而并不进行展开进而更加紧凑。下面介绍如何将其展开为 3 个方程。

• 方程(2.2)第一项表示 U 对时间的偏导数,因为 U 为矢量,故其导数的分量形式为:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial t} \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} \\ \frac{\partial u_3}{\partial t} \end{bmatrix}$$
 (2.3)

其中 u_1 表示 x 方向速度, u_2 表示 y 方向速度, u_3 表示 z 方向速度。这样拆分之后的方程,即为各个方向的速度针对时间的偏导数。如果理解方程(2.3)有困难,那么有必要预习一下《高等数学》(同济大学版)第二章。

• 方程(2.2)第二项 $\nabla \cdot (UU)$ 中的 UU 是一种简写,完整形式为 $U \otimes U$, \otimes 是一个张量运算符。依

 $^{^{1}}$ 如果难以理解二阶张量的含义,可以这样尝试:矢量是一阶张量,具有三个分量,二阶张量则具有 9 个分量。

第二章 方程标识

据 \otimes 的定义, UU 可以写为:

$$\mathbf{U} \otimes \mathbf{U} = \mathbf{U}\mathbf{U} = \mathbf{U} \cdot \mathbf{U}^{T} = \begin{bmatrix} u_{1} \\ u_{2} \\ u_{3} \end{bmatrix} [u_{1}, u_{2}, u_{3}] = \begin{bmatrix} u_{1}u_{1} & u_{1}u_{2} & u_{1}u_{3} \\ u_{2}u_{1} & u_{2}u_{2} & u_{2}u_{3} \\ u_{3}u_{1} & u_{3}u_{2} & u_{3}u_{3} \end{bmatrix}$$
(2.4)

接下来看 $\nabla \cdot$,其为散度算符,有时用 div 来表示。对一个矢量(1 阶张量)做散度的结果为一个标量(0 阶张量),对一个 2 阶张量做散度的结果为矢量(1 阶张量)。因此,对任意 n 阶张量做散度操作之后,结果为 n-1 阶张量。举例,对一个矢量 \mathbf{U} 做散度有: $\nabla \cdot \mathbf{U} = \frac{\partial u_1}{\partial x} + \frac{\partial u_2}{\partial y} + \frac{\partial u_3}{\partial z}$ 。因此,方程(2.2)中的第二项 $\nabla \cdot (\mathbf{U}\mathbf{U})$ 即为对一个 2 阶张量做散度:

$$\nabla \cdot (\mathbf{U}\mathbf{U}) = \nabla \cdot \begin{bmatrix} u_1 u_1 & u_1 u_2 & u_1 u_3 \\ u_2 u_1 & u_2 u_2 & u_2 u_3 \\ u_3 u_1 & u_3 u_2 & u_3 u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_1 u_1}{\partial x} + \frac{\partial u_2 u_1}{\partial y} + \frac{\partial u_3 u_1}{\partial z} \\ \frac{\partial u_1 u_2}{\partial x} + \frac{\partial u_2 u_2}{\partial y} + \frac{\partial u_3 u_2}{\partial z} \\ \frac{\partial u_1 u_2}{\partial x} + \frac{\partial u_2 u_3}{\partial y} + \frac{\partial u_3 u_3}{\partial z} \end{bmatrix}$$
(2.5)

• 方程(2.2)第三项也存在 ∇ , 这一项中没有了·符号。单独的 ∇ 表示梯度运算, 有时也被写为 grad。 对一个标量 (0 阶张量) 做梯度的结果为一个矢量 (1 阶张量), 对一个矢量做梯度的结果为 2 阶张量。因此, 对任意 n 阶张量做梯度之后的结果为 n+1 阶张量。举例, 对一个标量 p 做梯度有:

$$\nabla p = \begin{bmatrix} \frac{\partial p}{\partial x} \\ \frac{\partial p}{\partial y} \\ \frac{\partial p}{\partial z} \end{bmatrix}$$
 (2.6)

方程($\frac{2.2}{}$)第四项 $\nabla \cdot (\nabla \mathbf{U})$ 为对速度 \mathbf{U} 先做梯度再做散度。 $\nabla \cdot \nabla$ 通常也写为 ∇^2 ,并称为拉普拉斯算子,有时也被写为 laplacian。即 $\nabla \cdot (\nabla \mathbf{U}) = \nabla^2 \mathbf{U}$ 。现尝试对其进行展开:

$$\nabla \cdot (\nabla \mathbf{U}) = \nabla \cdot \begin{bmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x} & \frac{\partial u_2}{\partial x} & \frac{\partial u_3}{\partial x} \\ \frac{\partial u_1}{\partial y} & \frac{\partial u_2}{\partial y} & \frac{\partial u_3}{\partial y} \\ \frac{\partial u_1}{\partial z} & \frac{\partial u_2}{\partial z} & \frac{\partial u_3}{\partial z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u_1}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u_1}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u_2}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u_2}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_3}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u_3}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u_3}{\partial z} \right) \end{bmatrix}$$
(2.7)

结合方程(2.3)、(2.5)、(2.6)、(2.7)这四项,有三个方程。下面仅列出 x 方向(取各个项展开形式中的第一行):

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} + \frac{\partial u_1 u_1}{\partial x} + \frac{\partial u_2 u_1}{\partial y} + \frac{\partial u_3 u_1}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u_1}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u_1}{\partial z} \right) \tag{2.8}$$

方程($\frac{2.8}{2.8}$)即为关于 u_1 的方程。仔细观察方程($\frac{2.8}{2.8}$),其只不过是各种导数的加和。除了 u_1 之外,如果所有的变量均为已知,那么就可以求出 u_1 关于时间的步进(看第一项速度关于时间的导数)。方程($\frac{2.8}{2.8}$)的特点可参考第一章论述的内容。

2.2 张量标识法

CFD 中的偏微分方程除了用矢量标识法表示外,还可以用张量标识法表示,这种方法在 SCI 论文 以及书籍中也非常常见 [20]。在张量标识法中,符号的下标表示张量的阶数。如标量压力 p 可以记为 (二者无区别):

$$p \equiv p \tag{2.9}$$

2.2 张量标识法 5

矢量 U 可以写为 u_i :

$$u_i \equiv \mathbf{U} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} \tag{2.10}$$

二阶张量 τ 定义为 τ_{ii} :

$$\tau_{ij} \equiv \boldsymbol{\tau} = \begin{bmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} & \tau_{13} \\ \tau_{21} & \tau_{22} & \tau_{23} \\ \tau_{31} & \tau_{32} & \tau_{33} \end{bmatrix}$$
(2.11)

一定需要注意,在使用张量标识法的时候, u_i 表示矢量而不是某个具体的分量。举例说明:如果某文章采用张量标识法,则 u_i 表示速度矢量, u_1 表示x 方向速度分量。这和上一节的写法是不同的。在本笔记中,U 表示速度矢量, u_i 表示各个方向的分量而不是速度矢量,其中 i=1,2,3。因此,遇到 u_i ,采用不同的数学表示方法,其含义可能不同。张量标志法通常结合爱因斯坦操作符使用变成非常强大的武器。举例说明: 当在做乘积操作的时候,如果某一项中下标重复,那么则需要进行加和,如:

$$a_i b_i = \sum_{i=1}^3 a_i b_i = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$$
 (2.12)

$$\tau_{ij}\tau_{ij} = \sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} \tau_{ij}\tau_{ij} =$$

 $\tau_{11}\tau_{11} + \tau_{12}\tau_{12} + \tau_{13}\tau_{13} + \tau_{21}\tau_{21} + \tau_{22}\tau_{22} + \tau_{23}\tau_{23} + \tau_{31}\tau_{31} + \tau_{32}\tau_{32} + \tau_{33}\tau_{33} = \boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\tau} \quad (2.13)$

$$\tau_{ij}u_{j} = \sum_{j=1}^{3} \tau_{ij}u_{j} = \begin{bmatrix} \tau_{11}u_{1} + \tau_{12}u_{2} + \tau_{13}u_{3} \\ \tau_{21}u_{1} + \tau_{22}u_{2} + \tau_{23}u_{3} \\ \tau_{31}u_{1} + \tau_{32}u_{2} + \tau_{33}u_{3} \end{bmatrix} = \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{U}$$
(2.14)

方程(2.14)中 $\tau_{ij}u_i =$ 的 j 出现两次,需要加和。i 出现一次,表示矢量。

对于二阶张量,将在一项中最少出现两个下标如 i,j。例如下文方程中 $D_{ik}E_{kj}$ 中的 i,j 表示二阶 张量,k 表示加和:

$$\tau_{ij} = D_{ik} E_{kj} = \sum_{k=1}^{3} D_{ik} E_{kj} = D_{i1} E_{1j} + D_{i2} E_{2j} + D_{i3} E_{3j} = \mathbf{DE}$$
(2.15)

$$\tau_{ij} = D_{ki} E_{kj} = \sum_{k=1}^{3} D_{ki} E_{kj} = D_{1i} E_{1j} + D_{2i} E_{2j} + D_{3i} E_{3j} = \mathbf{D}^{\mathsf{T}} \mathbf{E}$$
 (2.16)

张量标识法中还存在若干基本函数,如克罗内克函数 δ_{ij} :

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \tag{2.17}$$

很明显:

$$\delta_{11} = \delta_{22} = \delta_{33} = 1 \tag{2.18}$$

$$\delta_{12} = \delta_{21} = \delta_{13} = \delta_{31} = \delta_{23} = \delta_{32} = 0 \tag{2.19}$$

6 第二章 方程标识

同样的,对于偏微分方程组也可以进行类似的表示。例如对于下面的方程(即连续性方程):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_1}{\partial x} + \frac{\partial \rho u_2}{\partial y} + \frac{\partial \rho u_3}{\partial z} \equiv \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0$$
 (2.20)

其中 $\frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i}$ 中出现两次 i,则需要加和。对于下面的方程(即动量方程),其可以表示为:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \tag{2.21}$$

其中 $\frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j}$ 中出现两次 j,则需要加和。出现一次 i,则表示分量。因此其为一个矢量的方程。现在随意从文献中抽取一个方程,如文献 [20] 中 $k-\varepsilon$ 模型的湍流动能方程,即方程 (4.9) 为2:

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \rho \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \mu_t / \sigma_k) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right]$$
 (2.22)

对其分析可知首先其为一个标量方程而非矢量方程组,且其展开形式为:

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \sum_{j=1}^{3} \rho u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \rho \varepsilon + \sum_{j=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \mu_t / \sigma_k) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right]$$
(2.23)

2.3 偏导标识法

CFD 一个重要分支是高超音速动力学。在高超音速研究领域,大量的文章和书籍中均采用偏导标识法进行方程分析 [16]。在偏导标识法中,方程(2.3)可以表示为:

$$\mathbf{U}_t \equiv \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \tag{2.24}$$

同理, 压力 p 对 x 的导数可以写为:

$$p_x \equiv \frac{\partial p}{\partial x} \tag{2.25}$$

一维连续性方程的偏导标识法可以写为:

$$\rho_t + (\rho u_1)_x = 0 (2.26)$$

三维连续性方程的偏导标识法可以写为:

$$\rho_t + (\rho u_1)_x + (\rho u_2)_y + (\rho u_3)_z = 0 \tag{2.27}$$

方程(2.27)在矢量标识法中可以表示为:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \tag{2.28}$$

$$\tau_{ij}\frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \tau_{11}\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \tau_{12}\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \tau_{13}\frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \tau_{21}\frac{\partial u_2}{\partial x_1} + \tau_{22}\frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \tau_{23}\frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \tau_{31}\frac{\partial u_3}{\partial x_1} + \tau_{32}\frac{\partial u_3}{\partial x_2} + \tau_{33}\frac{\partial u_3}{\partial x_3} = \nabla \mathbf{U}: \boldsymbol{\tau}$$

因此,不可压缩 $k-\varepsilon$ 的矢量标识法形式为

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}k) - \nabla \cdot ((\mu + \mu_t/\sigma_k)\nabla k) = \nabla \mathbf{U} : \tau - \varepsilon$$

方程左侧分别为k的时间项、对流项以及扩散项,右侧分别为产生项与耗散项。

 $^{^2}$ 读者在这里应该尝试将其写为矢量标识法。例如,对 $au_{ij} rac{\partial u_i}{\partial x_j}$ 展开有:

2.4 运算符标识法 7

另外,在偏导标识法中,偏微分系统通常用下面的方程表示:

$$q_t + Aq_x = 0 (2.29)$$

其中 q 可以为标量,也可以为矢量。如果 q 为矢量,且具备 m 个分量,那么 A 则表示 $m \times m$ 阶矩阵。例如下面的气动声学方程

$$\begin{cases} p_t + \rho c^2 u_x = 0\\ u_t + (1/\rho)p_x = 0 \end{cases}$$
 (2.30)

其中未知量为 p 和 u, ρ 和 c 为密度和声速, 其可以写为下面更好理解的形式:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} p \\ u \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & c^2 \rho \\ 1/\rho & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} p \\ u \end{pmatrix} = 0 \tag{2.31}$$

在这种情况下有:

$$q = \begin{bmatrix} p \\ u \end{bmatrix}, A = \begin{bmatrix} 0 & c^2 \rho \\ 1/\rho & 0 \end{bmatrix}$$
 (2.32)

偏导标识法的这种写法可以更好的用于分析偏微分方程系统的数学特征。

2.4 运算符标识法

运算符标识法在文章中比较少见,其只不过是将数学符号翻译为相应的英文名字。例如,在笛卡尔 坐标系下有

$$\operatorname{div} \mathbf{U} = \nabla \cdot \mathbf{U} \tag{2.33}$$

$$\operatorname{grad} p = \nabla p \tag{2.34}$$

laplacian
$$p = \operatorname{div} \operatorname{grad} p = \nabla \cdot (\nabla p)$$
 (2.35)

$$\operatorname{curl} \mathbf{U} = \nabla \times \mathbf{U} \tag{2.36}$$

在这里需要注意的是,前文使用的 ▽ 算符在不同的坐标系下需要转换。但运算符标识法不需要转换。

第二章 方程标识

第三章 流体与 N-S 方程

3.1 导论

流体通常泛指气体和液体。不同于固体,流体在施加剪切力的时候,会发生形变。且流体没有固定的形态。流体在快速变形的时候,也会存在一种抵抗的力,这种抵抗的力一旦流动停止,也即消失。流体这种抗拒本身发生变形的力称之为<u>粘性力</u>。不同的流体存在不同的粘性力。有些流体的粘性很大,有些流体的粘性很小。大部分日常生活中接触的为<u>牛顿流体</u>,其形变率和剪切力呈现线性的关系。部分流体为非牛顿流体,其剪切率和形变率呈现非线性的关系。

标准状态下,一立方毫米气体包含大约 2.43×10^{16} 个分子。由于气体分子之间的碰撞非常频繁,有效的将气体分子合理的进行了分布。因此这些粒子群表现的并不是单一的粒子而是连续介质。标准情况下,气体分子每秒钟大约进行 10^9 次碰撞,每一次碰撞导致移动的距离非常小(约 5×10^{-8} 米)。前者即所谓的碰撞频率,后者即所谓的分子自由程。

液体不同于气体的典型特征为其对体积变化的巨大抵抗力。例如我们不能把一瓶矿泉水压缩成一瓶盖的大小。然而气体对体积变化的抵抗力是相对小的。例如我们可以轻易地用手对一个封闭的空的矿泉水瓶进行压缩。基于流体的密度是否为常数,进一步可以分为<u>不可压缩流体和可压缩流体。液体通常考虑为不可压缩流体。虽然气体比液体的可压缩性高很多,但是是否考虑气体的可压缩性主要取决于具体情况。比如在空气动力学中,如果我们的气流速度很小,气体的可压缩性对汽车的设计影响较小,但是对于飞机,其速度有可能和声速接近或者大于声速,在这种情况下气体的可压缩性对飞机的设计非常重要。有些高压容器中,即使是液体,也应该考虑可压缩性。因为只有考虑了可压缩性,才能解释某些奇怪的物理现象,比如水锤。</u>

特殊的情况下存在一些特殊的现象。比如宇宙中的空气接近真空,这种通常被称之为<u>稀薄气体</u>。稀薄气体由于气体的分子数量太少,因此气体的碰撞并不均衡。另一种为基本无碰撞的颗粒流,在颗粒不相互碰撞的情况下,会发生<u>颗粒轨迹交叉</u>,也就是一个粒子从左向右移动,另一个粒子从右向左移动,在某个位置,两个粒子彼此穿过并不发生碰撞。以上两种情况为一些极端的情况,这些情况并不能用Navier-Stokes (N-S) 方程来描述。在这里需要表明的是 N-S 方程最重要的前提是<u>连续介质假定</u>。其可以理解为一个网格单元内存在大量的流体分子或固体颗粒。分子/颗粒之间碰撞均衡。这种情况下才能使用 N-S 方程来描述。在 N-S 方程不能描述的情况下,只能调用玻尔兹曼方程。本笔记仅仅考虑碰撞均衡的 N-S 方程¹。

CFD 是采用计算机求解控制流体流动的偏微分方程组的学科。以日常生活中的电风扇吹风为例。 电风扇吹出来的空气的流动看不见、摸不着,但是能明显的感觉吹出来的风不一样。风扇转的越快,风

 $^{^1}$ 若流体的特征长度 L 远远大于平均分子自由程 λ ,若流体的分子碰撞次数在标准状态下分子的碰撞频率左右(不远低于),则可用 N-S 方程进行描述。 λ 和 L 的比值为粒子克努森数。N-S 方程只在克努森数远远小于 1 的情况下适用。

越大越凉快,相对应的能耗也越多。工业上的设计目标就是用最小的能耗,吹出最大的风让一群人都很凉快。在这物理现象的背后,风扇吹出来的风的速度、压力、温度等均遵循相关的物理定律,这个物理定律可以写成数学中偏微分方程的形式,其主要有两个方程:一个是连续性方程(表明流动着的空气质量是守恒的),另一个是<u>动量方程</u>(表明空气的流动满足牛顿第二定律)。在考虑传热的情况下,还应该附加能量方程(表明能量守恒定律)。暂且可以这样理解:求解这两个关于时间的方程,就可以求出风扇出吹来的风在某一时刻的流速。有了流速之后,同时通过风扇叶片表面的受力计算一下风扇的功率,就可以算出耗电量进行相关的设计。如果通过实验,工程师可以设计 100 个叶片的形状,检测风力的大小和能耗并做分析,取最优的叶片形状。通过 CFD,工程师可以生成 100 个叶片的几何模型,用计算机求解这 100 个几何模型,就可以计算出风力的大小和能耗进行分析。在工业应用中,一个机翼的实验工作可能要花费上百万元,一个化工反应器的中试实验工作可能需要上亿。但是通过 CFD 计算模拟,可能需要几万元就可以了。可见,CFD 的目标是让工程师从实验中解脱,并节省实验资金,进而进行工业设计。在有些情况下,可能会听到一些新词汇,如数值风洞、数值水池等,这实际上就是用CFD 来模拟风洞内的流场、用 CFD 来模拟水池内水的流动。

问题在于,用于描述 CFD 的方程非常难解,甚至目前解析解(方程的准确解,比如 x=-1 是 x+1=0 的解析解)的存在与否都无从考证。目前 CFD 在学术上的研究,即如何获得这些方程的解,这些解通常被称之为<u>数值解</u>。在理想的情况下,数值解无限趋近于解析解。然而,理想很丰满,现实很 骨感。用户获得的数值解,总是和解析解存在或多或少的差距。

各种算法犹如各路神仙过河一样,总会通过各种奇葩的方法来获得 CFD 方程的数值解。比如 CFD 中有一种方法为光滑粒子法,其将流体看做是粒子,然后对这些粒子进行跟踪进行求解并获得数值解。最近,还有研究学者通过深度学习来假拟 CFD 的方程并求解。目前 CFD 求解方法中最广泛的,莫过于有限体积法。目前主流的 CFD 软件,均使用的有限体积法进行求解。

有限体积法的思想也很简单。举例,如果要分析整个河流的流动状态、整个房间的热流密度、血管内的血流状态,有限体积法是通过从局部到整体的方法进行分析。例如我们把整个房间分成一个个的小格子,如果可以获得每个小格子内的流动速度,那么这些格子构成的整体就是整个房间的流动速度。格子的数量越多,格子的速度场越能代表整个房间的速度场。本文主要介绍有限体积法。

3.2 泰勒公式

在推导 N-S 方程之前,有必要介绍一下泰勒公式。假设有函数 f(x),其用来表示整个 x 的型线。 泰勒公式可以理解为函数 f(x) 可以表示为若干个函数的加和:

$$f(x) = f(x_0) + \frac{\partial f(x)}{\partial x} \Big|_{x=x_0} (x - x_0) + \dots$$
 (3.1)

当 $x = x_1$ 的时候,泰勒公式可用于求 $f(x_1)$ 的值:

$$f(x_1) = f(x_0) + \left. \frac{\partial f(x)}{\partial x} \right|_{x=x_0} (x_1 - x_0) + \dots$$
 (3.2)

现以 $f(x) = x^3$ 举例,其导数为 $\frac{\partial f(x)}{\partial x} = 3x^2$ 。取 $x_0 = 2$,有 $f(x_0) = 8$,则有:

$$f(x_1) = 8 + 3 \times 2^2(x_1 - 2) + \dots$$
(3.3)

3.3 流动模型 11

如果 $x_1 = 3$,有 $f(x_1) = 20$ 。如果 $x_1 = 2.1$,有 $f(x_1) = 9.2$ 。可见 x_1 越来越趋向于 x_0 ,通过泰勒公式计算的值越精准。这在 CFD 中也反映了网格单元越小,结果越精准的特性。

泰勒公式也可用于多元函数, 如有函数 f(x,y,z,t), 其位于 (x_1,y_1,z_1,t_1) 点的泰勒展开可表示为 2 :

$$f(x, y, z, t) = f(x_1, y_1, z_1, t_1) + \frac{\partial f(x, y, z, t)}{\partial x} \Big|_{x=x_1} (x - x_1) + \frac{\partial f(x, y, z, t)}{\partial y} \Big|_{y=y_1} (y - y_1) + \frac{\partial f(x, y, z, t)}{\partial z} \Big|_{z=z_1} (z - z_1) + \frac{\partial f(x, y, z, t)}{\partial t} \Big|_{t=t_1} (t - t_1) + \dots (3.4)$$

3.3 流动模型

在谈具体的方程之前,首先需要介绍流动模型的概念。有限体积法是通过对每一个具体的流动模型进行分析,进而获得整体解的过程。在这里来理解流动模型可能会觉得比较抽象。但是在阅读完本文之后,回过头再来看流动模型,会有柳暗花明的感觉。

3.3.1 有限控制体模型

如图3.1所示,有限控制体其进一步可以分为<u>空间位置固定的有限控制体</u>,和<u>随流线运动的有限控制体</u>。空间位置固定的有限控制体可以理解为一个空旷的房间(当然控制体的体积要小的多),其会流入、流出某些物理量(如质量能量等),这些量的产生和消失符合物理学基本定律。举例,这个房间内部充满了人(不能再容纳更多的人),如果挤进来 10 个人,那么必然会挤出去 10 个人。即为<u>质量守恒</u>。随流线运动的有限控制体可以理解为随风飘扬的一个气球,气球内部存在大量的空气,且空气和外界不发生交换(质量不变)。这个气球的运动当然满足物理的基本定律。

在后续的讨论中,可以看出<u>从有限控制体推导的方程为积分形式</u>,这是因为控制体相对下文讨论的 微团模型是更大的。且若采用空间位置固定的控制体,方程为<u>守恒型方程</u>。若采用随流线运动的控制体,方程为<u>非守恒型</u>。要透彻的理解 CFD 中守恒和非守恒的概念,目前来讲并不容易。在此只需要知道有不同的方程的概念就可以。

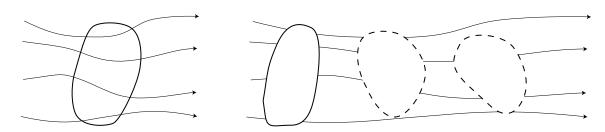


图 3.1: 左图: 空间位置固定的有限控制体,流体流入控制体后继续流出。右图: 空间位置移动的有限控制体,其沿着流体的流线进行移动。

²更详细的关于泰勒公式的内容请参考文献 [24]。

3.3.2 无穷小微团模型

如图3.2所示 3 ,类似有限控制体,无穷小微团也可以进一步分为空间位置固定的无穷小微团,和随流线运动的无穷小微团。无穷小微团和有限控制体的重要区别在于无穷小微团的体积、质量等变量可以用数学中的 $\mathrm{d}V$ 、 $\mathrm{d}m$ 来表示。有限控制体的体积要比无穷小微团要大,也即有限控制体中包含了大量的 $\mathrm{d}V$,需要用积分来表示。从数学的角度出发, $\mathrm{d}V$ 表示这个无穷小微团的体积足够小。需要注意的是,为了使得 CFD 方程适用于连续介质,这个 $\mathrm{d}V$ 还要包含一定量的流体分子 4 。正因为无穷小微团的各个属性可以用数学中的 d … 来表示,同时有限控制体包含了大量的流体微团,这也就体现了从有限控制体推导出来的方程为积分形式,从无穷小微团推导出来的方程为微分形式。现在以空间位置固

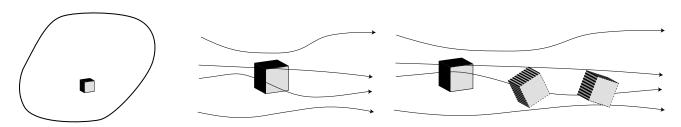


图 3.2: 左图: 有限控制体(大圈)和无穷小微团(小正方体)。中图: 空间位置固定的无穷小微团,流体流入微团后继续流出。右图: 空间位置移动的无穷小微团,其沿着流体的流线进行移动。

定的有限控制体或流体微团为例。我们要了解一个房间内流体的流动状况。如果房间内每个有限控制体或流体微团的流动均已知,那么我们就可以获得这个房间完整的流体流动图像。更形象的,我们把房间分为 9 个位置并用 9 个有限控制体或流体微团来表示,如果采用实验的方法对这 9 个有限控制体或流体微团检测速度,那么我们就可以认为这 9 个速度的场即为整个房间的速度场。如果我们把这个房间分为 N 块,并用实验的方法检测这 N 个位置的速度,我们会得到一个更精确的速度场。实际上,房间内的 N 块,即可以近似的理解为 CFD 中网格的概念。CFD 要做的,就是通过计算机,求解这些划分的小块上的物理量。

3.3.3 物质导数

物质导数就是数学中的全导数。理解物质导数需要借助上文中提及的流动模型。现选取随流线运动的无穷小微团上的温度 T(x,y,z,t) 进行分析。需要注意的是,在上文中指出无穷小微团上的变量可以微分算符 d 来表示,这里的温度并没有表示为 dT,其原因在于温度并不是一个随物质的量变化而变化的量。不管存在多少的分子,温度均为 T。类似的这种量,在 CFD 被称之为强度量。反之,质量体积等为广度量。

在 t_1 时间点,流体微团的位置在 (x_1,y_1,z_1) ,温度为 $T_1(x_1,y_1,z_1,t_1)$ 。随着微团的移动,在 t_2 时刻,位置变为 (x_2,y_2,z_2) ,同时温度为 $T_2(x_2,y_2,z_2,t_2)$ 。既然温度为时间和位置的函数,则可参考方

 $^{^3}$ 图中仅仅画出一个无穷小微团,若存在多个无穷小微团,每个无穷小微团应彼此相连并填充整个计算空间。也就是说整个计算域内应充满网格单元。

⁴N-S 方程并不是普适性的方程, 更为底层的为玻尔兹曼方程。只有满足连续性假定, 才能使得 BGK 假定成立, 进而将玻尔兹曼方程简化 为 N-S 方程。例如对于稀薄气体,由于并不满足连续性假定,因此 N-S 方程并不适用,只能通过数值方法求解玻尔兹曼方程(如矩方法 [19]、动理学格式方法 [21]、蒙特卡洛法 [5] 等)。对于多相流领域同样具有类似的情况,比如颗粒轨迹交叉问题就不满足连续介质假定 [17]。

3.3 流动模型 13

程(3.4)对温度进行泰勒展开:

$$T_{2} = T_{1} + \frac{\partial T}{\partial x} \bigg|_{x=x_{1}} (x_{2} - x_{1}) + \frac{\partial T}{\partial y} \bigg|_{y=y_{1}} (y_{2} - y_{1}) + \frac{\partial T}{\partial z} \bigg|_{z=z_{1}} (z_{2} - z_{1}) + \frac{\partial T}{\partial t} \bigg|_{t=t_{1}} (t_{2} - t_{1})$$
(3.5)

对方程 (3.5) 左右两边除以 $t_2 - t_1$ 有:

$$\frac{T_2 - T_1}{t_2 - t_1} = \frac{\partial T}{\partial x} \bigg|_{x = x_1} \frac{x_2 - x_1}{t_2 - t_1} + \frac{\partial T}{\partial y} \bigg|_{y = y_1} \frac{y_2 - y_1}{t_2 - t_1} + \frac{\partial T}{\partial z} \bigg|_{z = z_1} \frac{z_2 - z_1}{t_2 - t_1} + \frac{\partial T}{\partial t} \bigg|_{t = t_1}$$
(3.6)

接下来定义温度 T 在 (x_1, y_1, z_1) 点的物质导数为移动的无穷小微团通过 (x_1, y_1, z_1) 点的时候,无穷小 微团针对时间的温度瞬时变化率,即:

$$\frac{DT}{Dt}\Big|_{x=x_1, y=y_1, z=z_1} = \lim_{t_2 \to t_1} \frac{T_2 - T_1}{t_2 - t_1}$$
(3.7)

依据速度的定义,有 $\lim_{t_2\to t_1}\frac{x_2-x_1}{t_2-t_1}=u$, $\lim_{t_2\to t_1}\frac{y_2-y_1}{t_2-t_1}=v$, $\lim_{t_2\to t_1}\frac{z_2-z_1}{t_2-t_1}=w$,代入到方程(3.6)有 (x_1,y_1,z_1) 点的物质导数:

$$\frac{\mathrm{D}T}{\mathrm{D}t}\Big|_{x=x_1,y=y_1,z=z_1} = \frac{\partial T}{\partial x}\Big|_{x=x_1} u + \frac{\partial T}{\partial y}\Big|_{y=y_1} v + \frac{\partial T}{\partial z}\Big|_{z=z_1} w + \frac{\partial T}{\partial t}\Big|_{t=t_1}$$
(3.8)

对于任意一点,有

$$\frac{\mathrm{D}T}{\mathrm{D}t} = \frac{\partial T}{\partial x}u + \frac{\partial T}{\partial y}v + \frac{\partial T}{\partial z}w + \frac{\partial T}{\partial t}$$
(3.9)

方程 (3.9) 即为温度 T 在笛卡尔坐标系下的物质导数的定义。可见,物质导数即为数学上物理量对时间的全导数。

参考内积的数学定义,方程(3.9)可写为5:

$$\frac{\mathbf{D}T}{\mathbf{D}t} = \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla T \tag{3.10}$$

上述以温度 T 举例说明物质导数的由来。类似的,有速度 U 的物质导数:

$$\frac{\mathbf{D}\mathbf{U}}{\mathbf{D}t} = \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U} \tag{3.11}$$

速度的物质导数表示流体微团的加速度。除此之外,任何的流场数据都可以用物质导数来表示,如:

$$\frac{\mathbf{D}(0)}{\mathbf{D}t} = \frac{\partial(0)}{\partial t} + u\frac{\partial(0)}{\partial x} + v\frac{\partial(0)}{\partial y} + w\frac{\partial(0)}{\partial z} = \frac{\partial(0)}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla(0)$$
(3.12)

方程 (3.12) 中的 $\frac{\partial()}{\partial t}$ 又称为<u>局部导数</u>,第二项 $\mathbf{U} \cdot \nabla()$ 又称之为<u>对流导数</u>。需要注意的是,如果求解器不调用拉格朗日粒子,方程(3.10)左边的物质导数项并不能够直接求出,其只能通过方程右边计算而来。

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)^T$$

因此可以定义操作符 $\mathbf{U} \cdot \nabla$ 为 \mathbf{U} 与 ∇ 算子的内积:

$$\mathbf{U} \cdot \nabla = u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y} + w \frac{\partial}{\partial z}$$

这样, $\mathbf{U} \cdot \nabla T$ 也可以写成 $(\mathbf{U} \cdot \nabla)T$ 。同理:

$$(\mathbf{U} \cdot \nabla)\mathbf{U} = \begin{pmatrix} u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \\ u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \\ u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix}$$

⁵在这里要注意, ▽ 算子一般也可以写为:

方程(3.10)可以理解为:

$$\underbrace{\frac{\mathbf{D}}{\mathbf{D}t}}_{\text{Lagrangian}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla}_{\text{Euler}}$$
(3.13)

其中 $\frac{\partial}{\partial t}$ 表示对时间的变化率, $\mathbf{U} \cdot \nabla$ 表示对流的变化率。在这里增加一个对欧拉以及拉格朗日的解释,

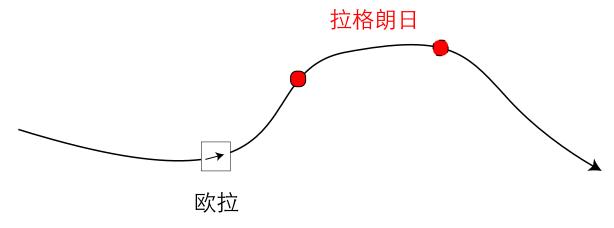


图 3.3: 欧拉与拉格朗日的描述。

如图3.3所示,欧拉方法描述一个固定点的变量的时间变化值,如图中方框内的变量。拉格朗日方法描述一个移动的粒子的变量的时间变化(如图中红色粒子的移动)。以温度举例,欧拉方法描述方框内温度随着时间的变化,拉格朗日方法描述移动的粒子的温度在不同的位置处随时间产生的变化。另外,拉格朗日方法的自变量通常为 t,欧拉方法的自变量通常为 (x,y,z,t)。例如,有粒子随时间变化的位置矢量定义为:

$$\mathbf{S} = (x, y, z) = (t^2, 2t, 0) \tag{3.14}$$

则有

$$x = t^2, y = 2t, z = 0 (3.15)$$

那么拉格朗日框架下的粒子的速度矢量通常表示为:

$$\mathbf{U}(t) = (2t, 2, 0) \tag{3.16}$$

欧拉框架下的速度矢量通常表示为:

$$\mathbf{U}(x, y, z, t) = (2t, 2, 0) = (2\sqrt{x}, 2, 0) \tag{3.17}$$

另外从方程(3.17)可以看出,针对本示例在固定的网格位置处的速度不变。从物理意义来讲,即粒子均以同样的速度通过某固定网格点。

3.4 连续性方程

CFD 的控制方程无论具有什么形式,都是建立在流体力学基本控制方程:连续性方程、动量方程、能量方程的基础之上⁷。他们主要来源于质量守恒定律、牛顿第二定律、能量守恒定律。N-S 方程最基

⁶在守恒法则研究领域,物质导数也表示沿着特征线的变量时间变化率。

⁷再一次强调,这里假定流动为平衡流,即分子碰撞是频繁的。

3.4 连续性方程 15

本的假设为:把流体看做是连续介质。当从宏观尺度来分析的时候(比如一微米),流体的随机分子运动可以忽略。这样,就可以描述流体的一些宏观物理量如速度、压力、密度和温度等。因为这些物理量可以看做大量分子的平均。本节一步一步地对连续性方程进行推导,旨在让同学们了解 CFD 中基本控制方程的来源,做到在 CFD 模拟的时候有理有据。复杂的方程离散、对流格式、双曲特征以及激波等将在 GCFD 课程中进行讲述。

3.4.1 微分形式

连续性方程可以在上文中的 4 种流动模型基础上进行推导而来,本节从空间位置固定的无穷小微团角度出发,对连续性方程进行推导。这种推导形式是最容易理解的,只涉及到高等数学中的泰勒方程。从空间位置固定的角度来分析的方法,通常被称之为欧拉观点。欧拉观点下的质量守恒意味着位置固定无穷小微团质量的变化 = 流入无穷小微团质量 - 流出无穷小微团质量。也即为:位置固定无穷小微团质量的变化率 = (流入无穷小微团质量 - 流出无穷小微团质量)的变化率。图3.4为一个质量守恒的实例。

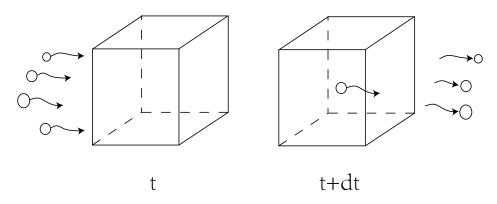


图 3.4: 质量守恒实例。在 t 时刻,有 4 单位的流体要流入无穷小微团(左图)。在 t+dt 时刻,有 3 单位的流体流出了无穷小微团(右图)。那么这个无穷小微团的变化,即为增加了 1 单位的流体(右图无穷小内增加 1 单位流体)。

下面首先看无穷小微团的质量的变化率。如上文所述,流体微团的体积可以表示为 $\mathrm{d}V=\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$ 。同时,有密度 ρ ,则对应的无穷小微团质量为

$$dm = \rho dx dy dz \tag{3.18}$$

依据质量变化率的定义(质量的变化除以时间的变化),其可以表示为

$$\frac{\partial dm}{\partial t} = \frac{\partial \rho dx dy dz}{\partial t} = \frac{\partial \rho}{\partial t} dx dy dz$$
(3.19)

下面考虑无穷小微团的流入和流出。在这里介绍一下泰勒方程的另一个形式:如果对于一个函数, x_0 点的值为 $f(x_0)$,那么 $x_0 + h$ 的值可以通过下述方程求得⁸:

$$f(x_0 + h) \approx f(x_0) + f'(x_0)h \tag{3.20}$$

现在看图3.5中的无穷小微团,定义立方体左侧单位面积的质量流量为 ρu ,其表示单位时间内流入单

 $^{^8}$ 在这里假定函数是连续可微的。然而对于某些特殊问题这种假定并不成立(例如存在激波的问题)。这种情况下需要从积分的角度推导连续性方程(参见下节)。

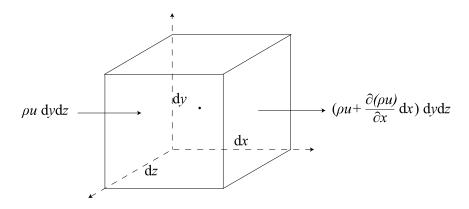


图 3.5: 无穷小微团 x 方向的通量。

位面积的质量(注意其中的单位时间和单位面积)。同时立方体左侧的面积为 $\mathrm{d}y\mathrm{d}z$,因此有单位时间内流入的质量为

$$\rho u dy dz$$
 (3.21)

对于立方体右侧的面,在已知立方体左侧面 ρu 的定义的时候,右侧可以通过泰勒方程求出,即单位时间内流出立方体右侧的单位面积的质量为 $\rho u + \frac{\partial \rho u}{\partial x} \mathrm{d}x$ 。同样的,立方体右侧的面的面积为 $\mathrm{d}y\mathrm{d}z$,因此有单位时间内流出的质量为

$$\left(\rho u + \frac{\partial \rho u}{\partial x} dx\right) dy dz \tag{3.22}$$

结合无穷小微团单位时间的流出质量,即方程(3.22),和无穷小微团单位时间的流入质量,即方程(3.21),有单位时间的x方向的净质量变化率为

$$\rho u dy dz - \left(\rho u + \frac{\partial \rho u}{\partial x} dx\right) dy dz = -\frac{\partial \rho u}{\partial x} dx dy dz$$
(3.23)

同理,有 y 方向的净质量变化率为

$$-\frac{\partial \rho v}{\partial y} \mathrm{d}x \mathrm{d}y \mathrm{d}z \tag{3.24}$$

z 方向的净质量变化率为

$$-\frac{\partial \rho w}{\partial z} \mathrm{d}x \mathrm{d}y \mathrm{d}z \tag{3.25}$$

将各个方向的质量变化率加和有

$$-\frac{\partial \rho u}{\partial x} dx dy dz - \frac{\partial \rho v}{\partial y} dx dy dz - \frac{\partial \rho w}{\partial z} dx dy dz = -\left(\frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z}\right) dx dy dz$$
(3.26)

同时,结合方程(3.19),有

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} dx dy dz = -\left(\frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z}\right) dx dy dz \tag{3.27}$$

也即为连续性方程:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} = 0 \tag{3.28}$$

方程(3.28)在 CFD 中至关重要,其直接关系到压力泊松方程的导出。在这里,同学们应该尝试去多次的理解连续性方程推导的本源,即连续性方程表示的是质量守恒。

3.4 连续性方程 17

3.4.2 积分形式

上文中从空间位置固定的无穷小微团推导的连续性方程是最容易理解的。下面考虑从空间位置固定有限控制体推导的连续性方程。本节涉及到高等数学的散度定律。若难以理解可跳过本节且不失去连续性。本节只不过是另一种推导连续性方程的途径。要提前强调的是,有限控制体和无穷小微团的关

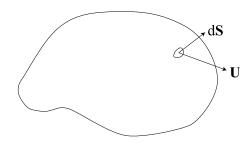


图 3.6: 有限控制体上的速度和面矢量。

系可以理解为有限控制体包含着很多的无穷小微团(如图3.2左图所示)。因此,有限控制体中的量都需要用积分来进行计算。对于空间位置固定的有限控制体,其质量可通过下面的方程进行计算:

$$\int \rho dV \tag{3.29}$$

其实际上就是高等数学中,质量的计算方程。其对应的质量变化率为

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho dV \tag{3.30}$$

下面考虑空间位置固定的有限控制体由于流入流出引起的质量变化。图3.6中的通量可以定义为

$$\rho \mathbf{U} \cdot \mathbf{dS} \tag{3.31}$$

那么整个有限控制体上的净通量可以表示为

$$-\int_{\mathbf{S}} \rho \mathbf{U} \cdot d\mathbf{S} \tag{3.32}$$

其中负号的引入是因为考虑的为流入减去流出的通量(而不是流出减去流入) 9 。结合方程($^{3.32}$)和方程($^{3.30}$),有

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V} \rho dV + \int_{\mathbf{S}} \rho \mathbf{U} \cdot d\mathbf{S} = 0 \tag{3.33}$$

也即10

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{U} = 0 \tag{3.34}$$

方程(3.34)即为通过空间位置固定的有限控制体推导的连续性方程,其和(3.28)是等价的。在这里需要注意的是,从方程(3.33)推导至(3.34)的时候,需要假定函数是光滑的连续的。因此积分形式的方程(3.33)是比微分形式的方程(3.34)更基础的控制方程。

方程(3.33)是一种形式的积分形式连续性方程。另一种形式的连续性方程可以写为:

$$\int_{V} \rho(t + \Delta t) dV - \int_{V} \rho(t) dV = -\int_{t}^{t + \Delta t} \left(\int_{\mathbf{S}} \rho(t) \mathbf{U} \cdot d\mathbf{S} \right) dt$$
 (3.35)

⁹流入的通量为负。

 $^{^{10}}$ 其中要调用高斯定律 $-\int \rho \mathbf{U} \cdot d\mathbf{S} = -\int \nabla \cdot \rho \mathbf{U} dV$

方程(3.35)的左边表示单位体积单位时间上质量的变化,右侧则考虑通量的变化形式,同样表示单位体积单位时间上质量的变化。方程(3.35)与(3.33)是相同的。方程(3.35)主要用于双曲系统来推导高阶通量格式。

3.4.3 通量与速度散度的物理意义

在这里有必要介绍通量的概念。因为初学者经常将对流项引申的量理解为通量。然而 CFD 控制方程中离散后很多项都可以称之为通量,比如对流项 $\nabla \cdot (\mathbf{U}\mathbf{U})$ 在做线性化后会出现对流通量。扩散项 $\nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{U})$ 离散后同样会出现扩散通量。进一步的,通量可区分为体积通量和质量通量。体积通量的物理意义为单位时间内流经某个网格单元面流体的体积,单位为 \mathbf{m}^3/\mathbf{s} 。质量通量的物理意义为单位时间内流经某个网格单元面流体的体积,单位为 \mathbf{m}^3/\mathbf{s} 。质量通量的物理意义为单位时间内流经某个网格单元面流体的质量,单位为 $\mathbf{k}\mathbf{g}/\mathbf{s}$ 。不同的场合通常选取不同的通量。对于不可压缩流体,通常选取体积通量,对于可压缩流体,通常选取质量通量。从数学的角度来理解更为简单:速度 \mathbf{U} 乘以面积 \mathbf{S} 就是体积通量,即每单位时间流经某个网格单元面多少立方米的流体:

$$\phi_f = \mathbf{U}_f \cdot \mathbf{S}_f \tag{3.36}$$

其中 ϕ_f 表示网格单元面 \mathbf{S}_f 上的通量, \mathbf{S}_f 也被称之为面矢量, \mathbf{U}_f 为定义在网格单元面上的速度。图3.7中左中右三个网格单元的最上方的网格单元面对应的三个面矢量,方向相同,大小不同。面矢量 \mathbf{S}_f 的大小可通过下式计算:

$$|\mathbf{S}_f| = \sqrt{S_x^2 + S_y^2 + S_z^2} \tag{3.37}$$

其中 S_x, S_y, S_z 表示面矢量 \mathbf{S}_f 的分量。

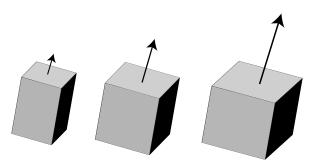


图 3.7: 上图中表示了相同方向,不同大小(箭头长度不同)的面矢量。

CFD 中另外一个重要的概念是面法向矢量 \mathbf{n}_f ,其用于定义面的法向,面法向矢量的特点是其模均为 1,计算公式为:

$$\mathbf{n}_f = \frac{\mathbf{S}_f}{|\mathbf{S}_f|} \tag{3.38}$$

如图3.8所示,在一个网格的边界区域,通常由若干个网格单元面构成,每个网格单元面则分别对应一个面矢量和面法向矢量。

除了边界面,网格的内部面也存在面矢量。图3.9表示为网格内部面的面矢量定义。图中的 S 为两个网格连接面的矢量,其垂直于网格面,大小等于面的面积。由宿主网格(图中 P 点)指向相邻网格(图中 N 点)。同时可以看出,连接 P 网格体心和 N 网格体心的矢量方向和 S_f 的方向并不相同。这会导致梯度的计算差异,也即 CFD 中的非正交修正算法,在此不做介绍。回到通量的计算公式,有:

$$\phi_f = \mathbf{U}_f \cdot \mathbf{S}_f = |\mathbf{U}_f| |\mathbf{S}_f| \cos\theta \tag{3.39}$$

3.4 连续性方程 19

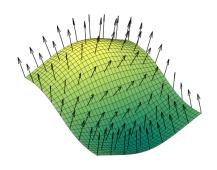


图 3.8: 任意的弯曲几何的面法向矢量。

其中 θ 为面矢量和面速度矢量的夹角。很明显通量的大小取决于夹角的大小。图3.10形象的表示了这一特性。左图中速度矢量和面矢量方向平行,则其中的虚线表示单位时间内通过面的体积。中图中的速度矢量和面矢量存在一定的夹角,因此体积有所减小。右图中速度矢量和面矢量垂直,因此没有任何流体通过这个面,因此通量为零。

附加几点有关通量的总结和评价:

- 通量的计算不仅和面的大小以及速度的大小有关,并且和面的方向以及速度的方向有很大关系;
- 有限体积法中的守恒表示为通量的守恒,然而通量上的面速度和网格单元体心处的速度是有区别的;
- 本文中面速度均为给定,但是在 CFD 计算中,一些通量需要从体心速度插值而来,一些通量需要通过压力速度耦合算法计算而来;
- 对于图3.9中的非矩形网格以及高偏斜网格,需要对应的非正交修正算法,或者采用最小二乘法计 算梯度;

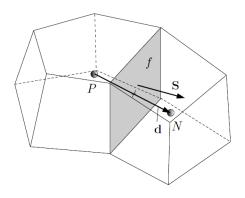


图 3.9: 网格单元内部面面矢量与网格体心点连线示意图。

下面介绍速度散度的物理意义,需要一些高等数学中积分的内容,若难以理解可不失去连续性的略过后续本节内容 11 。在考虑体积通量 ϕ_f (单位时间内流经某个面的流体体积)的物理意义的基础上。

¹¹但3.4.4节以此为基础展开。

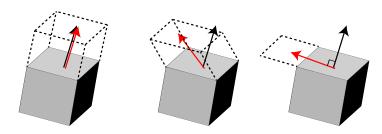


图 3.10: 不同速度矢量对应的通量大小, 其中黑色箭头表示面矢量, 红色箭头表示速度矢量。

如果在体积通量的基础上乘以时间 Δt ,则表示体积为 V 的流动控制体,由于其中的面 dS 以 U 的速度移动,在 Δt 时间内体积的变化量:

$$dV_f = \phi_f \Delta t = \mathbf{U}_f \cdot d\mathbf{S}_f \Delta t \tag{3.40}$$

因此,整个流动控制体的体积变量需要在方程(3.40)的基础上做积分:

$$\Delta V = \int_{V} dV = \int_{\mathbf{S}} \mathbf{U}_{f} \cdot d\mathbf{S}_{f} \Delta t \tag{3.41}$$

体积 V 的物质导数定义为

$$\frac{\mathrm{D}V}{\mathrm{D}t} = \frac{\Delta V}{\Delta t} = \int_{\mathbf{S}} \mathbf{U}_f \cdot \mathrm{d}\mathbf{S}_f \tag{3.42}$$

依据高等数学的散度定律有

$$\int_{\mathbf{S}} \mathbf{U}_f \cdot d\mathbf{S}_f = \int_{V} \nabla \cdot \mathbf{U} dV \tag{3.43}$$

即

$$\frac{\mathrm{D}V}{\mathrm{D}t} = \int_{V} \nabla \cdot \mathbf{U} \mathrm{d}V \tag{3.44}$$

方程(3.44)对体积 V 做积分。如果考虑体积 V 足够小,即 $V \to \delta V$,方程(3.44)在此 δV 可以表示为:

$$\frac{\mathrm{D}(\delta V)}{\mathrm{D}t} = \int_{\delta V} (\nabla \cdot \mathbf{U}) \mathrm{d}V \tag{3.45}$$

由于体积 δV 足够小, $\nabla \cdot \mathbf{U}$ 在此 δV 上都相等可以提出, 即

$$\int_{\delta V} (\nabla \cdot \mathbf{U}) dV = \nabla \cdot \mathbf{U} \delta V \tag{3.46}$$

结合方程(3.45)和(3.46)有:

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = \frac{1}{\delta V} \frac{\mathrm{D}\delta V}{\mathrm{D}t} \tag{3.47}$$

即速度散度的物理意义:每单位体积流动着的控制体体积随时间的变化率。

3.4.4 拉格朗日观点

上文是从空间位置固定的有限控制体以及无穷小微团下推导的连续性方程的。下面讨论另一种推导形式:从空间位置移动的无穷小微团推导的连续性方程。这种方式偏向于拉格朗日思想。若难以理解可跳过本节且不失连续性。本节只不过是另一种推导连续性方程的途径。

3.4 连续性方程 21

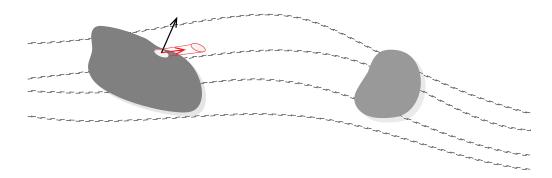


图 3.11: 流动的控制体由于速度的变化导致形状体积的改变,左图中面 dS 以 U 的速度移动,在 Δt 时间间隔内引起的体积变化为圆柱体体积。右图为最终的控制体形状。

在拉格朗日框架下, 随流线运动无穷小微团质量的变化 = 0。参考前文物质导数的定义, 即

$$\frac{\mathbf{D}}{\mathbf{D}t}\mathbf{d}m = 0\tag{3.48}$$

其中采用 dm 是因为跟踪的为无穷小微团。依据物质导数的定义,方程(3.48)可以化简为

$$\frac{\mathbf{D}}{\mathbf{D}t}dm = \frac{\mathbf{D}(\rho dV)}{\mathbf{D}t} = \rho \frac{\mathbf{D}(dV)}{\mathbf{D}t} + dV \frac{\mathbf{D}\rho}{\mathbf{D}t} = 0$$
(3.49)

即

$$\frac{\rho}{\mathrm{d}V} \frac{\mathrm{D}(\mathrm{d}V)}{\mathrm{D}t} + \frac{\mathrm{D}\rho}{\mathrm{D}t} = 0 \tag{3.50}$$

依据上一节介绍的物质导数和速度散度的物理意义,有

$$\frac{1}{\mathrm{d}V} \frac{\mathrm{D}(\mathrm{d}V)}{\mathrm{D}t} = \nabla \cdot \mathbf{U} \tag{3.51}$$

代入到方程(3.49),有

$$\frac{\mathrm{D}\rho}{\mathrm{D}t} + \rho\nabla\cdot\mathbf{U} = 0 \tag{3.52}$$

3.4.5 连续性方程小结

方程(3.28)、(3.34)以及(3.52)均表示连续性方程,但各自的推导采用了不同的流动模型。有的模型 出发点和推导比较容易理解,有的方法比较复杂。这些方程可以相互的转换。且各种教材中书写并不统 一。例如,下面的方程均为采用不同书写方式书写的连续性方程:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \tag{3.53}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{U}) = 0 \tag{3.54}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \tag{3.55}$$

 ∇ ·和 div 在笛卡尔网格下等价,均表示散度操作。方程(3.55)则是另一种书写方式。初学 CFD 可能对方程中的这些符号感到很生疏,在此记住下面最根本的的连续性方程形式即可:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} = 0 \tag{3.56}$$

3.5 动量方程

本节讨论动量方程。动量方程依然可以通过上面四种不同的流动模型进行推导。由于篇幅所限本 节不再一一推导,仅介绍一种较为容易理解的推导方法,即从空间位置移动的无穷小微团进行分析。在 推导之前,需要介绍一些基础的知识。

3.5.1 受力分析

对动量方程进行推导,就需要对无穷小微团进行受力分析。正是因为流体的受力,才会引致流体的流动。无穷小微团的受力可区分为<u>体积力和表面力</u>。表面力为作用在无穷小微团面上的力,如压力、表面张力,海洋表面上的风也可以认为是表面力。体积力作用在无穷小微团全部的体积上(不仅表面有,体积内也有),例如重力、电磁力,或者一切引起旋转的力(科氏力)。在这些力中,最重要的表面力为压力和应力(后续会对应力进行介绍),最重要的体积力为重力(若不考虑其他源项力)¹²。

首先看压力,如图3.12所示,CFD 中的压力用p来表示(其实际为压强),且这个压力表示静压。 其作用主要导致流体的压缩和膨胀,而不是切应力引致的变形。另外,压力为一种正应力(不同于下文中要介绍的切应力),其永远作用于无穷小微团的面的垂直的方向。同时,如图3.13所示,无穷小微团

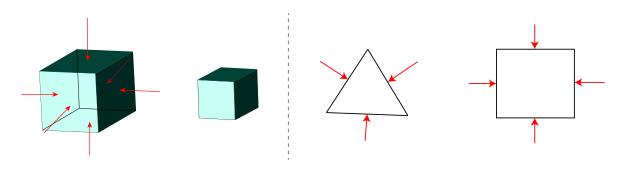


图 3.12: 左图: 无穷小微团由于压力的作用导致体积的压缩。右图: 三角形网格和四边形网格受到的垂直的压力。

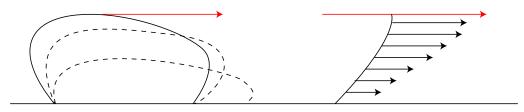


图 3.13: 左图: 一块蜂蜜由于剪切应力的作用导致的变形。右图: 流体由于上方剪切力作用导致的流速区别, 壁面附近速度较小。红色的箭头表示剪切应力, 黑色的箭头表示速度大小和方向。

还受到<u>剪切应力</u>的作用。其主要体现为流体的粘性。可以很明显的注意到,蜂蜜要比水要粘。这就是因为要获得同样大的形变率,施加给蜂蜜的剪切应力需要更大。<u>剪切应力的作用导致流体产生形变</u>。这个应力不是和形变成正比,而是<u>和形变的速率成正比</u>。也就是说,应力越大,形变的速度越快。

如图3.14左图所示,一个二维四边形无穷小微团所受的剪切应力分量分别为

$$\tau_{yy}, \tau_{yx}, \tau_{xx}, \tau_{xy} \tag{3.57}$$

¹²CFD 中的一些体积力与表面力需要特殊处理,否则会引起数值震荡,感兴趣的读者可以阅读相关文献了解相关信息 [22, 23]。

3.5 动量方程 23

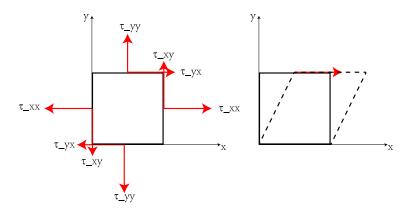


图 3.14: 左图: 一个四边形无穷小微团所受的剪切应力。右图: 一个四边形有限控制体受到剪切应力导致形变。

其中的 τ 表示剪切应力,第一个下标表示作用于与某方向垂直的平面,第二个下标表示力的方向。比如 τ_{yy} 表示作用于和 y 垂直的平面的剪切应力分量,其方向为 y 方向。 τ_{yx} 表示作用于和 y 垂直的平面的剪切应力分量,其方向为 x 方向。图3.14右图表示了流体由于剪切应力作用发生的形变。图3.15则是三维的无穷小微团受到的剪切应力。在三维的情况下,剪切应力的分量可以表示为

$$\tau_{xx}, \tau_{xy}, \tau_{xz}, \tau_{yx}, \tau_{yy}, \tau_{yz}, \tau_{zx}, \tau_{zy}, \tau_{zz} \tag{3.58}$$

其通常写成下面的形式:

$$\begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix}$$

$$(3.59)$$

同时要注意,剪切应力张量为一个对称的量。只有其为对称的(净扭矩为零),才能防止产生旋转。

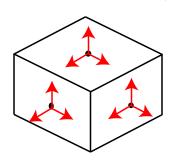


图 3.15: 三维剪切应力。

在这里,读者应该知道方程(3.59)中的剪切应力分量的定义是什么? 分别作用在哪个面? 哪个方向? 其会引起什么样的物理过程。下面来分析一个具体的无穷小微团受到的力。图3.16表示施加在无穷小微团 x 方向上的全部表面力¹³。在面 abcd 上,仅仅存在由切应力引起的 x 方向的分量 $\tau_{yx} \mathrm{d}x \mathrm{d}z$ 。面 efgh 和面 abcd 的距离为 $\mathrm{d}y$,所以 efgh 面上的 x 方向的切应力为 $(\tau_{yx} + (\partial \tau_{yx}/\partial y)\mathrm{d}y)\mathrm{d}x \mathrm{d}z$ 。对于面 abcd 和面 efgh 上的切应力,要注意他们的方向。在底面, τ_{yx} 是向左的(与 x 轴方向相反),在顶面, $\tau_{yx} + (\partial \tau_{yx}/\partial y)\mathrm{d}y$ 是向右的(与 x 轴方向相同)。这与下面的约定是一致的:即速度的三个分量的正的增量与坐标轴的正向一致。例如,图3.16中的平面 efgh,因为 u 沿着 y 轴正向是增加的,所以在稍

微高于平面 efgh 的地方,速度 u 要比平面 efgh 上的 u 大。于是就形成了"拉"的动作,试图将流体微团向右拉向 x 轴的正向。相反,若考虑平面 abcd,则在稍稍低于平面 abcd 的地方,速度 u 要比平面 abcd 上的 u 小。于是对流体形成了一个阻碍的作用,作用在 x 轴的负向。图3.16中其他剪切应力的方向,都可以用相同的方式进行判断。特别是在面 dcgh 上, τ_{zx} 指向 x 轴负向,而在面 abfe 上, $\tau_{zx}+(\partial\tau_{zx}/\partial z)$ dz 指向 x 轴正向。在垂直于 x 轴的面 adhe 上,x 方向的力有压力 pdydz,指向流体微团的内部;还有沿 x 轴负向的应力 τ_{xx} dydz。依据前面提到的速度增量方向的约定,我们可以解释为什么在图3.16中,面 adhe 上 τ_{xx} 是指向左边的。依据规定,速度 u 的正增量和 x 轴的正向一致,所以稍微离开面 adhe 左面一点点,u 的值比面 adhe 上的 u 要小。因此,正应力的粘性作用在面 adhe 上就好像是一个吸力,产生一个向左拉的作用,想要阻止流体微团的流动。与此相反,在面 bcgf 上,压力 $(p+(\partial p/\partial x)\mathrm{d} x)\mathrm{d} y\mathrm{d} z$ 指向流体微团的内部(沿着 x 轴负向)。而由于在稍微离开面 bcfg 右面一点点的地方,u 的值比面 bcfg 上的 u 要大,就会产生一个由正应力引起的吸力,将流体微团向右拉,这个力的大小为 $(\tau_{xx}+(\partial\tau_{xx}/\partial x))\mathrm{d} y\mathrm{d} z$,方向指向 x 轴正向。如果上面的描述同学们感觉难以理解,下面的结论要知悉。通过对流体微团 x 方向的受力做分析,有 x 方向所受到的表面力(压力和剪切应力贡献)为:

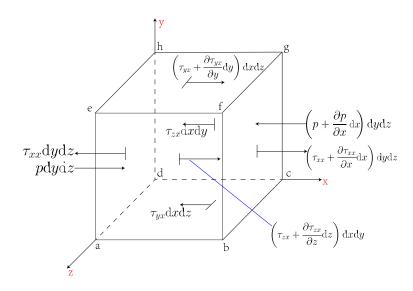


图 3.16: x 方向各个面受到的力。

$$F_{x} = \left(p - \left(p + \frac{\partial p}{\partial x} dx\right)\right) dy dz + \left(\left(\tau_{xx} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} dx\right) - \tau_{xx}\right) dy dz + \left(\left(\tau_{yx} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} dy\right) - \tau_{yx}\right) dx dz + \left(\left(\tau_{zx} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} dz\right) - \tau_{zx}\right) dx dy$$
(3.60)

即

$$F_x = \left(-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z}\right) dx dy dz$$
(3.61)

同理,有 y 方向和 z 方向:

$$F_{y} = \left(-\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z}\right) dx dy dz$$
(3.62)

3.5 动量方程 25

$$F_z = \left(-\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z}\right) dx dy dz$$
(3.63)

方程(3.61)、(3.62)和(3.63)即为流体微团在三个方向上的受力(为一个矢量):

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \left(-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right) \mathrm{d}x \mathrm{d}y \mathrm{d}z \\ \left(-\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} \right) \mathrm{d}x \mathrm{d}y \mathrm{d}z \\ \left(-\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right) \mathrm{d}x \mathrm{d}y \mathrm{d}z \end{bmatrix}$$
(3.64)

3.5.2动量守恒

在分析完受力之后,回到牛顿第二定律,即力等于质量乘加速度。力已经在方程(3.64)中给出,现 在来看质量和加速度。在上文中,已经知道流体微团的质量可以表示为 $\mathrm{d}m = \rho \mathrm{d}x \mathrm{d}y \mathrm{d}z$,同时,流体微 团的加速度为 DU (参考物质导数一节), 其分量形式为

$$\left[\frac{\mathrm{D}u}{\mathrm{D}t}, \frac{\mathrm{D}v}{\mathrm{D}t}, \frac{\mathrm{D}w}{\mathrm{D}t}\right]^{\mathrm{T}} \tag{3.65}$$

那么有 x 方向的动量方程为

$$\rho dx dy dz \frac{Du}{Dt} = \left(-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z}\right) dx dy dz$$
(3.66)

同理, y 方向和 z 方向可以类似导出。即

$$\rho \frac{\mathrm{D}u}{\mathrm{D}t} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z}$$
(3.67)

$$\rho \frac{\mathrm{D}v}{\mathrm{D}t} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z}$$
(3.68)

$$\rho \frac{\mathrm{D}w}{\mathrm{D}t} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z}$$
(3.69)

方程(3.67)、(3.68)和(3.69)即动量方程。同学们应该结合上文介绍的相关知识,将方程(3.67)、(3.68)和(3.69)左 边项写成欧拉形式(参考物质导数一节)。然后,再将这三个分量形式的动量方程写成矢量形式(结合 张量一节) 14:

$$\rho \frac{\mathbf{D}\mathbf{U}}{\mathbf{D}t} = -\nabla p + \nabla \cdot \tau \tag{3.70}$$

也即为

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau \tag{3.71}$$

守恒/非守恒转化 3.5.3

方程(3.71)为动量方程的非守恒形式。这是因为上述动量方程是从空间位置移动的无穷小微团进行 推导的。非守恒控制方程可通过结合连续性方程转化为守恒的控制方程。将连续性方程(3.53)左右乘以 U有

$$\mathbf{U}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{U}\nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \tag{3.72}$$

$$\rho \frac{\mathrm{D}\mathbf{0}}{\mathrm{D}t} = \nabla \cdot \sigma$$

 $\rho \frac{\mathrm{DU}}{\mathrm{D}t} = \nabla \cdot \sigma$ 其中 $\sigma = -p\mathbf{I} + \tau$ 。在这种情况下 σ 考虑的为总应力(剪切应力 τ 和正应力 p 的和)。

¹⁴ 另一种常见的写法为

随后将方程(3.72)与(3.71)相加有

$$\mathbf{U}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{U}\nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) + \rho \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \rho \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U} = -\nabla p + \nabla \cdot \tau \tag{3.73}$$

即守恒形式的动量方程:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau \tag{3.74}$$

连续性方程可以进行类似的转化。考虑从空间位置移动的无穷小微团进行推导的连续性方程(3.52),依据物质导数的定义将其展开有

$$\frac{\mathrm{D}\rho}{\mathrm{D}t} + \rho\nabla\cdot\mathbf{U} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathbf{U}\cdot\nabla\rho + \rho\nabla\cdot\mathbf{U} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot\rho\mathbf{U} = 0$$
 (3.75)

其中 $\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{U}$ 为非守恒形式, $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{U}$ 为守恒形式。

同理,守恒形式的方程,在假定原始变量光滑的情况下,可以演变为非守恒形式。

3.5.4 封闭

方程(3.67)、(3.68)和(3.69)还不能求解,因为其中的未知量为方程左边的速度,但方程右边还存在未知量 τ ,这种<u>待求未知量之外还存在未知量的情况,被称之为封闭问题</u>。为了将其封闭,需要将 τ 表示为 \mathbf{U} 的函数。剪切应力 τ 和速度 \mathbf{U} 的关系,被称之为<u>本构关系</u>。他们的方程,被称之为本构方程。17 世纪末牛顿指出,流体的剪切应力和速度的梯度成线性关系。这种流体因此也被称之为牛顿流体。还存在一些不符合牛顿流体定义的流体,被定义为非牛顿流体,会展现一些不常见的流动特性。

下面讨论一个新的 CFD 变量: 形变率,其也被称为剪切速率。未知量 τ 可以表示为形变率的函数,形变率进一步可以表示为速度的函数。这样,方程(3.67)、(3.68)和(3.69)就可以封闭。形变率和剪切应力类似,是一个二阶张量,一般用 S 来表示。但由于在 CFD 中,形变率本身并不会封闭方程(而是形变率和速度的关系封闭了方程),因此在 CFD 方程中往往不会出现形变率这一项¹⁵。若 S 符号表示形变率,即:

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} S_{xx} & S_{xy} & S_{xz} \\ S_{yx} & S_{yy} & S_{yz} \\ S_{zx} & S_{zy} & S_{zz} \end{bmatrix}$$
(3.76)

对于各向同性流体,形变率的9个分量有6个是独立的:

$$S_{xy} = S_{yx}, S_{xz} = S_{zx}, S_{yz} = S_{zy} \tag{3.77}$$

当然也存在一些各向异性流体,如一些聚合物。对这些流体的研究会导致问题更加复杂。当然,很多模型都是从各向同性假定出发的。形变率进一步的可以表示为速度的方程:

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x} + \frac{\partial u_1}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial y} + \frac{\partial u_2}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial z} + \frac{\partial u_3}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_2}{\partial x} + \frac{\partial u_1}{\partial y} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_2}{\partial y} + \frac{\partial u_2}{\partial y} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_2}{\partial z} + \frac{\partial u_3}{\partial y} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_3}{\partial x} + \frac{\partial u_1}{\partial z} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_3}{\partial y} + \frac{\partial u_2}{\partial z} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_3}{\partial z} + \frac{\partial u_3}{\partial z} \right) \end{bmatrix}$$

$$(3.78)$$

若写成矢量形式,有:

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^{\mathrm{T}} \right) \tag{3.79}$$

 $^{^{15}}$ S 这个符号在有限体积法中更倾向于被定义为面矢量。

3.5 动量方程 27

对于牛顿流体,其定义<u>剪切应力和形变率为线性的关系</u>。进一步考虑不可压缩流体(忽略体膨张率) 16:

$$\tau = 2\mu \mathbf{S} = \mu \left(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^{\mathrm{T}} \right) \tag{3.80}$$

其中 μ 是粘度,其为一个物理属性。将方程(3.80)代入到方程(3.74)中,其中的 τ 就被速度表示出来进而被封闭(其中的密度 ρ 被除掉):

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}\mathbf{U}) = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nabla \cdot \left(\nu \left(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^{\mathrm{T}} \right) \right) \tag{3.81}$$

其中 $\nu = \frac{\mu}{\rho}$ 。方程(3.81)中的 $\nabla \cdot \left(\nu \left(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^{\mathrm{T}}\right)\right)$ 在大量文献中被写为 $\nabla \cdot (\nu \nabla \mathbf{U})$,下面我们来看一下为什么。首先有¹⁷

$$\nabla \mathbf{U} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x} & \frac{\partial u_2}{\partial x} & \frac{\partial u_3}{\partial x} \\ \frac{\partial u_1}{\partial y} & \frac{\partial u_2}{\partial y} & \frac{\partial u_3}{\partial y} \\ \frac{\partial u_1}{\partial z} & \frac{\partial u_2}{\partial z} & \frac{\partial u_3}{\partial z} \end{bmatrix}$$
(3.82)

对其转置操作有

$$\nabla \mathbf{U}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_{1}}{\partial x} & \frac{\partial u_{1}}{\partial y} & \frac{\partial u_{1}}{\partial z} \\ \frac{\partial u_{2}}{\partial x} & \frac{\partial u_{2}}{\partial y} & \frac{\partial u_{2}}{\partial z} \\ \frac{\partial u_{3}}{\partial x} & \frac{\partial u_{3}}{\partial y} & \frac{\partial u_{3}}{\partial z} \end{bmatrix}$$
(3.83)

然后求散度有18

$$\nabla \cdot (\nabla \mathbf{U}^{\mathrm{T}}) = \nabla \cdot \begin{bmatrix} \frac{\partial u_{1}}{\partial x} & \frac{\partial u_{1}}{\partial y} & \frac{\partial u_{1}}{\partial z} \\ \frac{\partial u_{2}}{\partial x} & \frac{\partial u_{2}}{\partial y} & \frac{\partial u_{2}}{\partial z} \\ \frac{\partial u_{3}}{\partial x} & \frac{\partial u_{3}}{\partial y} & \frac{\partial u_{3}}{\partial z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_{1}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u_{2}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u_{3}}{\partial x} \right) \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_{1}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u_{2}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u_{3}}{\partial y} \right) \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_{1}}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u_{2}}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u_{3}}{\partial z} \right) \end{bmatrix} = 0$$
 (3.84)

这是因为对于任何一个标量 a, 有

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial a}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial a}{\partial y} \right) \tag{3.85}$$

因此,动量方程(3.81)可写为

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}\mathbf{U}) = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nabla \cdot (\nu \nabla \mathbf{U})$$
(3.86)

这个封闭的方程若展开,为 3 个方程,且存在未知项速度 \mathbf{U} 和压力 p 共 4 个未知量,即可求解。对于可压缩流体,结合方程 $\mathbf{Eq.}$ (3.80) 的脚注,有完整的动量方程为

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot \left(\mu \left(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^{\mathrm{T}} \right) - \frac{2}{3} \mu \left(\nabla \cdot \mathbf{U} \right) \mathbf{I} \right)$$
(3.87)

$$\frac{\partial u_1}{\partial x} + \frac{\partial u_2}{\partial y} + \frac{\partial u_3}{\partial z} = 0$$

则

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u_2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u_3}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_2}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_3}{\partial z} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x} + \frac{\partial u_2}{\partial y} + \frac{\partial u_3}{\partial z} \right) = 0$$

 $^{^{16}}$ 可压缩流体完整形式为 $\tau = \mu \left(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^{\mathrm{T}} \right) - \lambda (\nabla \cdot \mathbf{U}) \mathbf{I}$, 其中 λ 为体积粘度,也被称之为第二粘度系数等。Stokes 认为 $\lambda = \frac{2}{3}\mu$,进一步, $\nabla \cdot \mathbf{U} = 0$,因此可以化简。

 $^{^{17}}$ 值得注意的是 ∇U 的定义并不唯一,在流体力学中通常采取本文的定义。

¹⁸以 x 分量为例, 有连续性方程

注意其中的 $\nabla \mathbf{U}^{\mathrm{T}}$ 并不能化简,因为可压缩流体的 $\nabla \cdot \mathbf{U} \neq 0$ 。

读者应该仔细观察动量方程的 3 个分量方程,观察矢量形式下的散度、梯度算法如何和分量形式的方程对应。做到对动量方程不陌生、不恐惧。其只不过是各种偏导数放在了一起。具体如何通过有限体积法离散、数值格式以及算法稳定性等内容将在 GCFD 课程上介绍。

3.5.5 积分观点

动量的定义为质量和速度的乘积,若将动量除以体积,即 ρu 表示为动量密度。考虑一维的区域, (x_1,x_2) 的区间范围内的动量可以表示为:

$$\int_{x_1}^{x_2} \rho u \mathrm{d}x \tag{3.88}$$

其变化率可表示为:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{x_1}^{x_2} \rho u \mathrm{d}x \tag{3.89}$$

 (x_1, x_2) 内的动量变化率取决于流入和流出的通量。如何表示动量的通量?参考质量通量的定义,对于质量通量,其为密度和速度的乘积。那么动量的通量即为动量密度和速度的乘积,即 ρuu 。另外,压力也会引致动量的变化,因此, $\rho uu + p$ 表示动量的通量, (x_1, x_2) 内流入减去流出的通量为

$$-\left(\rho u u+p\right)_{x_1}^{x_2} \tag{3.90}$$

结合方程(3.89),有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{x_1}^{x_2} \rho u \mathrm{d}x = -\left(\rho u u + p\right)\Big|_{x_1}^{x_2} \tag{3.91}$$

上式即为积分观点下推导的一维动量方程。

如果进一步假定 $\rho uu + p$ 是光滑的, 方程(3.91)可以写为:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{x_1}^{x_2} \rho u \mathrm{d}x = -\int_{x_1}^{x_2} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} (\rho u u + p) \mathrm{d}x \tag{3.92}$$

进一步操作有

$$\int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{\mathrm{d}\rho u}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} (\rho u u + p) \right) \mathrm{d}x = 0 \tag{3.93}$$

即

$$\frac{\mathrm{d}\rho u}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(\rho u u + p) = 0 \tag{3.94}$$

方程(3.94)即不考虑剪切变形(τ 的非对角线元素为 0)的一维的动量方程。本节呈现的是另一种动量方程的推导形式,更好的展现了从积分的角度推导动量方程的思想。

在这里需要注意的是,积分形式的方程和微分形式的方程有重要的区别。积分形式的方程(3.91)可以在控制体内出现间断。因为数学上并没有要求被积分的函数不能出现间断。但微分形式的方程(3.94)要求函数是连续的(上文中引入假定 $\rho uu+p$ 是光滑的),否则不可导。积分形式的 CFD 方程更加基础,更加普适性。同时,在网格变形的情况下,自动满足体积守恒方程。积分形式的 CFD 方程也适用于各种不同的网格形状。但之所以将积分形式的方程放在最后是因为积分形式的方程中会出现面积分,例如三维的连续性方程可以写为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{V} \rho \mathrm{d}V + \int_{\mathbf{S}_f} \rho_f \mathbf{U}_f \mathrm{d}\mathbf{S}_f = 0 \tag{3.95}$$

看起来对初学者并不友好。

3.6 学习要求与思考 29

3.6 学习要求与思考

上述内容完整详细的推到了普适性 CFD 最基本的控制方程: N-S 方程。在 GCFD 课堂中,将进一步讲解 N-S 方程的数值离散。至此,读者应该牢记连续性方程与动量方程的最终形式:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \tag{3.96}$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau \tag{3.97}$$

读者应该清楚方程(3.96)的第一项、第二项表示什么物理意义,(3.97)的第一项、第二项、第三项、第四项表示什么物理意义。同时,对各项的数学推导过程有大致的印象。N-S 方程是大量算法的根基,例如,直接模拟 DNS 就是调用高阶格式直接求解 N-S 方程,多相流 VOF 模型就是在 N-S 方程的基础上添加表面张力等体积力(体积力在哪一个方程中有体现?在方程的哪一侧?)。欧拉拉格朗日算法就是连续性方程使用 N-S 方程来描述,颗粒相使用拉格朗日算法来描述。湍流模型则是通过数值的方法增加方程的粘度使得易于收敛(粘度在方程中哪里有所体现?)。牛顿流体假定一个恒定的粘度项,非牛顿流体流动则是将粘度表示为可变的变量。相变过程则是在相分数方程和速度方程添加源项来实现等。

虽然基于 N-S 方程可以进行各种模型的演变。但在离散求解中,任何一个小问题都可能会演变为最后的发散,例如,粘度过大可能会导致方程刚性、附加体积力的梯度项可能导致数值震荡、不依附于流线的对流项会导致较大的数值耗散,另外,如何处理温度小于 0 的情况? 为什么有些情况湍流粘度过大? 湍流模型的参数是否可以改动? 速度压力迭代次数是否可以减少提高效率? 为什么模拟过程中无法算出湍流? 计算中所有的参数在数值上都有什么意义? 所有这些内容,都属于 CFD 算法研究的内容。

在这里,读者可以重新翻到本笔记的前言部分,进一步了解 N-S 方程更加奇妙的数值特性。

本章内容不需要参加 GCFD 课程的学员掌握,仅做介绍,激发兴趣,理解即可。

4.1 湍流

湍流的流动状态是非常瞬态的。如果将速度对时间做数据提取,会发现其呈现一个非常随机的波动状态。且流动中存在大量的涡。湍流过程将具有不同动量的流体单元"打散"且"混合"到一起。同时由于粘性的作用,速度的梯度会趋向于减小,并进一步的减小动能。这些动能被转化为内能。湍流有些情况是让人喜欢的,有些情况却让人厌恶。如果过程中需要加强传递与混合,那么湍流会让研究学者欣喜若狂。另一方面,对动能的掺混需要附加能量,这可能会大幅的增加能量消耗支出。最理想的情况下,是调用尽可能少的能量(如电能),获得最大的湍流效应来增加混合效果。

在下文中,会发现湍流的数值模拟需要引入大量的模型,并且会导致计算不稳定。但为什么大家都对湍流如此感兴趣?这是因为飞机要上天、要对天气预报进行预测,类似的过程都是湍流的。正所谓处处皆湍流。

最早对湍流进行研究的是 Reynolds。1895 年左右, Reynolds 提出了一种时间平均方法, 因此, 在后期相当一定的时间内, 雷诺平均主要指的是时间平均。1877 年, Boussinesq 参考分子梯度扩散的数学形式, 引入涡粘的概念。随后, Reynolds 和 Boussinesq 在湍流领域一夜成名, 一直在现在, 对两人的研究只需要点到为止,都不需要引用。

但是 Reynolds 和 Boussinesq 并没有对湍流模型进行求解。在 19 世纪,湍流模型的结果一直是一个迷。直到 1904 年,Prandtl 发现了边界层的概念(原始文献为德语版),并于 1925 年提出了混合长模型(德语版),并可以通过混合长来计算湍流粘度。在随后的近 30 年中,混合长湍流模型成为了其他湍流模型的理论基础。当代,Prandtl 的混合长模型通常被称之为<u>零方程湍流模型</u>。顾名思义,零方程湍流模型中,不存在传输方程,仅仅通过代数关系式就可以获得湍流粘度。进一步的,Prandtl 在 1945年,提出了一种一方程湍流模型(德语版),其将湍流粘度与湍流动能的概念建立起来,并组建一个偏微分方程组来对湍流动能进行传输。

与此同时,Kolmogorov 认为除了应该考虑湍流动能,还应该考虑一个变量 ω 。这个变量表示的是每单位体积单位时间的能量耗散。 ω 的倒数表示湍流的时间尺度。 $k\omega$ 则类似于湍流耗散率 ε 。1942 年,Kolmogorov 构建了 k 和 ω 的偏微分方程,这是最早的一种<u>两方程湍流模型</u>。很遗憾,当时并没有计算机能求解这种湍流模型。除了这些湍流模型之外,最早的<u>二阶矩湍流模型</u>可以追溯到 Rotta 在 1951 年的工作(德语版)。二阶矩湍流模型也就是雷诺应力传输模型。所有这些模型都是在 1955 年之前提出的。

1960年代之后,大量的湍流模型开始涌现,并可以通过计算机进行求解。2020年,如果将所有的

湍流模型进行归类,湍流的数值研究方法主要有三种:直接模拟 (Direct Numerical Simulation, DNS), 大涡模拟 (Large Eddy Simulation, LES) 以及雷诺平均法 (Raynolds-averaged Navier-Stokes, RANS)。 本节对这三种方法进行简述。

4.1.1 直接模拟

直接模拟是对湍流进行数值研究最精确的方法。直接模拟直接求解 N-S 方程,不附加任何湍流模型。因此,从概念上理解的话,直接模拟是一种最简单的方法。上升到实践,如果采用 OpenFOAM 进行直接模拟的话,只需要将流动设置为层流即可。为了精确的捕获到流动中的湍流,需要注意计算域大小。首先,计算域的整体大小,应该是流动中可能存在的最大的涡的尺度的数倍以上。同时,为了捕获所有的能量耗散,网格尺度还需要与最小的粘性尺度相符合。这种最小的尺度通常被称之为 Kolmogoroff 尺度。

直接模拟预测的结果包含了大量的信息。但是,这些信息并不是所有都至关重要。对于这种耗时 且极为占据存储空间的数值方法,直接模拟目前主要在学术界采用。随着计算机能力的提升,2020年, 一些个人工作站已经也可以进行一些直接模拟计算。

对于直接模拟的求解方法。有限体积法由于精度问题受限。主流的方法是有限差分法与谱方法。不管采用什么样的方法,需要注意的就是方法的精度。例如,对于一阶迎风格式,其在数学上等于在方程中添加了一个数值耗散项。这种耗散项对算法有稳定性作用。对于稳态问题,这种耗散可能无关紧要。但对于瞬态问题,这种人工添加的耗散可能不会捕获尖锐的速度梯度导致直接模拟的结果失真,丧失准确性。

另外一个极为重要的问题就是直接模拟的边界条件设置。对于初始条件,其必须包含足够的流场细节。最好的情况下,是给定一个从实验获得的真实的流场。但这是非常困难的。同样的,对于边界条件,尤其是进口边界条件,必须包含足够的流场信息来"形成"湍流。

出口边界条件相对简单。通常采用的边界条件就是法向梯度为 0。但,另外一种方式是使用一种对流非稳态出口边界条件。比如,对 ϕ 变量,可以调用下述边界条件:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi = 0 \tag{4.1}$$

在开源 CFD 软件 OpenFOAM 中,上述边界条件被称之为无反射边界条件。在壁面处,可以使用无滑移边界条件。但是通常在壁面处,会存在一些细微的非常重要的"条带"结构。这些结构需要非常精细的网格才能处理。另外需要注意的是,对称边界条件通常是不适用与直接模拟与大涡模拟的。因为虽然在雷诺平均中,可以将壁面当做对称面来处理,但是在直接模拟中,对称面的脉动速度必然不是对称的。

4.1.2 大涡模拟

湍流中的大涡往往比小涡更具有能量。这样来看,或许可以直接对大涡进行非模化的跟踪,将小涡模化处理。这就是大涡模拟的思想起源。大涡模拟同样是三维的并且是随时间瞬态变化的。在直接模拟不现实的情况下,通常可以采用大涡模拟来捕获流场结果。在一些领域(如气候科学、湍流燃烧等领域),大涡模拟已经成为不可或缺的研究方法。

 $^{^{1}}$ 在这里有一些关于无反射边界条件在 DNS 模拟中的讨论。

4.1 湍流 33

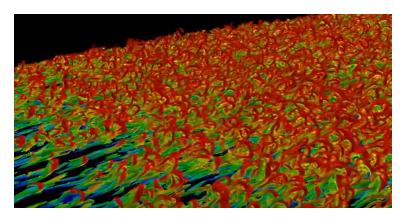


图 4.1: 湍流近壁条带结构 [4]。

大涡模拟需要定义一个速度变量,这个速度变量包含且仅仅包含大尺度的结构。因此,这个速度变量通常被称之为滤波速度(filtering velocity)。滤波速度跟滤波尺度, Δ ,有关。大涡模拟认为,尺度大于 Δ 就是大涡,尺度小于 Δ 就是小涡。大涡直接解析,小涡需要模化。

不同于直接模拟,由于大涡模拟需要进行模化,因此需要对控制方程进行推导。在这里推荐大家参考CFD 中的大涡模拟这篇文章来获取更详细的信息。大涡模拟中,最重要的模型在于将亚格子应力进行模化(Subgrid-Scale Stress, SGS)。最直观的方法是采用 Bousinessq 方法来处理:

$$\tau - \frac{1}{3} \operatorname{tr}(\tau) \mathbf{I} = -\nu_{SGS} (\nabla \bar{\mathbf{U}} + \nabla \bar{\mathbf{U}}^{T}) + \frac{2}{3} \nu_{SGS} (\nabla \cdot \bar{\mathbf{U}}) \mathbf{I}$$
(4.2)

其中 τ 为亚格子应力, $\bar{\mathbf{U}}$ 表示滤波速度, ν_{SGS} 表示大涡粘度。在 Smagorinsky 湍流模型中,大涡粘度可以表示为

$$\nu_{\rm SGS} = C_{\rm SGS} \Delta \sqrt{k_{\rm SGS}} \tag{4.3}$$

其中 $k_{\rm SGS}$ 表示亚格子动能, $C_{\rm SGS}$ 表示无经验常数。对于各向同性湍流, $C_{\rm SGS}\approx 0.2$ 。然而对于不同的雷诺数以及流形, $C_{\rm SGS}$ 倾向于并不是一个常数。例如,在开源 CFD 软件 OpenFOAM 中, $C_{\rm SGS}$ 的值被定义为 0.095。在这种情况下,大涡粘度小了一倍之多。在槽道流靠近壁面的区域, $C_{\rm SGS}$ 需要更小。这也就是 van Driest 阻尼模型的思想本源。另一种方式是,定义一个随时间与位置变化的 $C_{\rm SGS}$,这就是动态亚格子应力模型的出发点。

对于大涡模拟,在提升网格分辨率的情况下,截断误差以及亚格子应力模化的误差都随之减小。因此,大涡模拟不存在网格无关性这一说。跟直接模拟方法一样,大涡模拟的边界条件以及初始条件均异常敏感,需要复杂的方法进行给定。

4.1.3 雷诺平均以及其他

雷诺平均法目前是工程上应用最广泛的方法。例如,很多工程师对一些物体的升阻力、流体的混合程度感兴趣。在这种情况下使用直接模拟和大涡模拟就有些大材小用了。雷诺平均法也存在稳态与瞬态一说。对于稳态算例,所有的非稳态因素都被平均的过程抹掉了。对于瞬态算例,雷诺平均法应捕获相应的瞬态因素。稳态的雷诺平均通常采用时间平均法,非稳态的雷诺平均通常采用集合平均法。

在进行雷诺平均的过程中,同样需要对模型进行封闭。再一次的,Boussinesq 假定发挥了重要的作用。Boussinesq 假定将未封闭的湍流应力与湍流粘度联合起来,这样,就把未知量转化为了湍流粘度变量。在获得湍流粘度之后,N-S 方程即可进行求解。

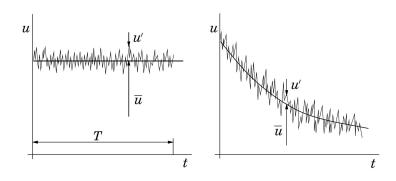


图 4.2: 时间平均和集合平均 [12]。

目前存在大量的湍流粘度封闭方法。如线性涡粘法、非线性涡粘法等。在线性涡粘法中,湍流粘度可以通过一个代数方程求出。比如,可以将湍流粘度与湍流动能以及湍流动能耗散率联合起来:

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{4.4}$$

其中 C_{μ} 为模型自定义常数, k 为湍流动能, ε 为湍流动能耗散率。进一步的, 其中的 k 与 ε 可以通过 $k-\varepsilon$ 湍流模型进行求解获得。除此之外,还有大量的其他模型可用于求解湍流粘度,如 Spalart–Allmaras 模型、 $k-\omega$ 模型等。依据未知的变量数,这些模型又可以分为一方程模型(如 Spalart–Allmaras 模型具有一个未知变量)、二方程模型(二个未知变量,如 $k-\omega$ 模型)等。

不同于大涡模拟与直接模拟,雷诺平均法对初始条件以及进口边界条件没有那么敏感。实际操作中,使用固定值进口边界条件以及零法向梯度出口边界条件即可。对于壁面,则需要调用壁面函数。在一些情况下,壁面函数对流场结果是高度相关的。同时,还存在一些不需要壁面函数的雷诺平均模型,比如 Lam Bremhorst $k-\varepsilon$ 湍流模型 [15]。这些模型也通常被称之为低雷诺数湍流模型。

除了上文提到的直接模拟、大涡模拟以及雷诺平均。还有一些湍流模型比如分离涡模型(Detached Eddy Simulation, DES)、雷诺应力模型(Reynolds Stress Model, RSM)等。分离涡模型认为使用大涡模拟进行全场的涡旋捕获是没必要的。因此分离涡模型在壁面处使用雷诺平均类模型(主要是 Spalart-Allmaras 模型以及 SST 模型),在主流区调用大涡模拟。这种模型也通常被称之为混合类模型。在雷诺应力模型中,不需要调用 Bousinessq 近似去模化。它直接对雷诺应力构建偏微分方程进行求解。对于对称二阶张量,存在六个独立变量,因此雷诺应力模型中需要组建 6 个传输方程。

4.1.4 二维直接模拟/大涡模拟

目前学术界普遍的看法是:"无三维涡,则无湍流"。"只有在三维的情况下,流体自身的涡旋才能伸展。"另但是大量的文献依旧通过二维大涡模拟、甚至二维直接模拟进行相关研究。例如,Bouris and Bergeles 的文章中表示 [6]

"针对本文的算例,确实大量的文献表明大涡模拟只能进行三维计算,因为二维模拟缺少相关的涡旋特征。但是,本文的研究同样表明,这样一棒子打死二维大涡模拟也不是那么容易的。我们的结果表示二维大涡模拟相对于任何的雷诺平均法都优越。然而,从物理本质来考虑,除非计算机硬件存在限制,最好还是进行三维大涡模拟。"

在 Roohi et al. 的这篇文章中, 作者们表示 [18]:

"本文使用二维大涡模拟的原因主要是其可以节省计算资源。正如我们的研究在 3.3 节中讨论到,针对非稳态空化流动,雷诺平均法获得的流场并不让人满意。因此,二维大涡模拟必然比雷诺平均更为优越。并且,前人也有大量的研究表明,二维大涡模拟可以获得跟实验值非常贴近的结果。因此,对于某些特定的情况,二维大涡模拟是精准的。很明显,我们的模拟结果和实验的符合也验证了这个说法。"

同样,一些研究学者非常激进,比如 Breuer 在研究中表示 [7]:

"我们的研究表示二维的大涡模拟,甚至直接模拟完全是扯淡的。这是因为物理上流动的物质相互影响是三维的,即使是那些看起来非常二维的计算流域也是如此。"

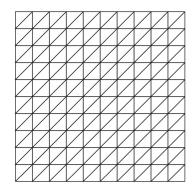
总体来看,目前学术界,对于二维直接模拟/大涡模拟的观点,尚不统一,仍需探索。

4.2 结构网格与非结构网格的区别

结构网格与非结构网格的区别主要在于网格节点的编号形式。结构网格的网格节点通常可以按照次序排列,对于三维网格,通常按照 i,j,k 的形式排列。例如 y 方向上游与下游的网格序号可以表示为 i,j-1,k, i,j+1,k 等,上游的上游节点可以表示为 i,j-2,k。由于结构网格寻址方便,因此在结构 网格上很容易拓展高阶格式。非结构网格则不限定于网格编号形式。其通过复杂的网格连接性来定义 网格编号,例如需定义网格节点序号、定于网格节点与面相连接的序号等。结构网格思想更偏向于有限 差分。有限体积法则不限定于任何网格类型,更适用于非结构网格。

由于有限差分法诞生较早,有限体积法诞生较晚。有限差分主要使用规则的结构网格来进行。同时,对于方程离散的各个项,有限差分的方式更易于理解。因此,CFD 教材中大量的采用结构网格与有限差分结合的方式进行介绍。现存商业/开源 CFD 软件为了追求普适性,很少使用结构网格的方式进行寻址。在这里强调一些常见的误区:

- 结构网格单元不一定是四边形或六面体。结构网格单元也可以是三角形等。如图4.3所示,其中的三角形网格也可以用 i,j,k 进行标识。
- 四边形、六面体网格也可能是非结构网格。如图4.4所示,是一种六面体非结构网格,由于几何中心部位进行了糙化处理,无法通过 i,j,k 进行寻址,这是一种多块六面体非结构网格。



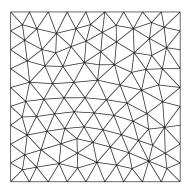


图 4.3: 三角形结构网格(左)与非结构网格(右)。

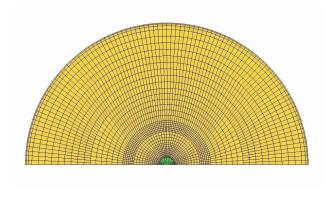


图 4.4: 六面体非结构网格 [13]。

4.2.1 非结构网格通量计算

下面我们通过一个简单的范例,讨论如何在非结构网格下进行通量计算,形象的演示非结构网格的相应规则。该范例相应的算法为开源 CFD 软件 OpenFOAM 中的相应算法。

非结构网格最重要的是进行相应的标识。对于一个网格内部面,其对应 owner 网格单元与 neighbour 网格单元。在图4.5中,左侧与右侧的区别在于速度的方向不同。左侧速度的方向与面试量为近似同向,因此 $\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{U}_f$ 为正值。同时,owner 单元的流体流出,neighbour 单元有流体流入。右侧速度的方向与面试量为近似反向,因此 $\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{U}_f$ 为负值。owner 单元有流体流入,neighbour 单元有流体流出。

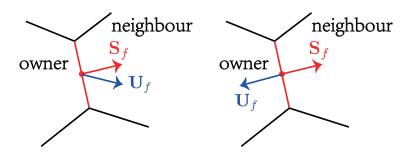


图 4.5: 非结构网格示意图。图中 \mathbf{S}_f 表示面矢量, \mathbf{U}_f 表示速度矢量。

下面考虑传输方程:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{U}) = 0 \tag{4.5}$$

其中的对流项 $\nabla \cdot (\phi \mathbf{U})$ 进行离散后,可以看出,对于某个网格单元,离散后的 $\nabla \cdot (\phi \mathbf{U})$ 如果为正值,下一个时间步的 ϕ 将减小,即当前网格单元有流体流出。反之,如果离散后的 $\nabla \cdot (\phi \mathbf{U})$ 如果为负值,表示当前网格单元有流体流入。考虑图4.5中的左侧,owner 网格单元有流体流出,对于 owner 单元,红色的面的通量(注意 $\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{U}_f$ 本身为正值)需为正值,对于 neighbour 单元,红色的面的通量需为负值 ($\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{U}_f$ 本身为正值,添加负号则变成负值)。这样其对 owner 的贡献会导致下一个时间步的 ϕ 的减少,对 neighbour 的贡献会导致下一个时间步的 ϕ 的增加。反之,对于右侧的网格单元,由于通量是流入 owner 单元。因此,对于 owner 网格单元,红色的面的通量需为负值(注意 $\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{U}_f$ 本身为负值)。对于 neighbour 网格单元,红色的面的通量为正值。

下面,考虑整个网格系统的通量计算。一种方式是,对每个网格单元的面进行遍历操作,然后加和,获得当前网格单元的值。但由于每个面链接 2 个网格单元。这种操作实际上会遍历两次面单元。会导

致效率损失。在开源 CFD 软件 OpenFOAM 中,仅仅需要遍历一次网格单元,即可求出面通量。具体的,考虑图4.6,对于网格面 1,其通量 $\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{U}_f < 0$,因此流体流入 own 单元,对应的,own 单元的离散后的 $\nabla \cdot (\phi \mathbf{U})$ 增加。对于网格面 2,其通量 $\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{U}_f > 0$,流体流出 own 单元,own 单元的离散后的 $\nabla \cdot (\phi \mathbf{U})$ 减少。

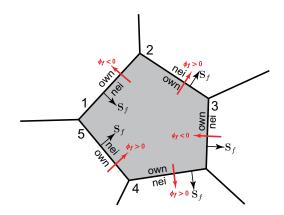


图 4.6: 非结构网格示意图。

4.2.2 非结构网格 TVD 格式范例

参考图4.7,在结构网格中,TVD 格式通过定义变量 r 来计算通量限制器。在结构网格中,r 定义为

$$r = \frac{\psi_{\rm C} - \psi_{\rm U}}{\psi_{\rm D} - \psi_{\rm C}} \tag{4.6}$$

r 可以用来衡量网格面处的光滑度。如果在此处是光滑的,则 $r\approx 1$ 。如果此处存在间断,则 r 远远不等于 1。然而在非结构网格中,不存在 U 网格点的值。在 90 年代,OpenFOAM 的前身 foam 就植入了非结构网格的 TVD 格式。相关工作也在 Jasak 的博士论文中被讨论 [14]。在这里简述这种非结构网格 TVD 格式,读者也可参考 2003 年 Darwish and Moukalled 的相关工作 [10]。

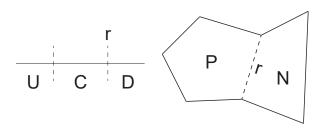


图 4.7: 结构网格(左侧)、非结构网格(右侧)示意图。虚线表示控制体面。其中 r 为 TVD 格式需要定义的变量

方程 Eq. (4.6) 中可以拓展为:

$$r = \frac{\psi_{\rm C} - \psi_{\rm U}}{\psi_{\rm D} - \psi_{\rm C}} = \frac{(\psi_{\rm D} - \psi_{\rm U}) - (\psi_{\rm D} - \psi_{\rm C})}{\psi_{\rm D} - \psi_{\rm C}}$$
(4.7)

在非结构网格中, $\psi_D - \psi_U$ 被认为是网格 C 点的梯度乘以网格 D 与 U 的方向矢量:

$$\frac{\psi_{\rm D} - \psi_{\rm U}}{\mathbf{d}_{UD}} = \nabla \psi_{\rm C} \tag{4.8}$$

其中 \mathbf{d}_{UD} 表示非结构网格上连接虚拟的 U 点与 D 点的矢量:

$$\mathbf{d}_{UD} = \mathbf{x}_D - \mathbf{x}_U \tag{4.9}$$

一旦 \mathbf{d}_{UD} 可求,那么 $\psi_{\mathrm{D}} - \psi_{\mathrm{U}}$ 可求。目前,OpenFOAM 中认为

$$\mathbf{d}_{UD} = 2\mathbf{d}_{CD} \tag{4.10}$$

这样,有:

38

$$\psi_{\mathcal{D}} - \psi_{\mathcal{U}} = 2\nabla\psi_{\mathcal{C}}\mathbf{d}_{CD} \tag{4.11}$$

因此, 非结构网格中 TVD 格式的 r 定义为:

$$r = \frac{2\nabla\psi_{\mathcal{C}}\mathbf{d}_{CD}}{\psi_{\mathcal{D}} - \psi_{\mathcal{C}}} - 1 \tag{4.12}$$

在图4.7右侧显示的非结构网格中, r 即为:

$$r = \frac{2\nabla \psi_{\mathbf{P}} \mathbf{d}_{PN}}{\psi_{\mathbf{N}} - \psi_{\mathbf{P}}} - 1 \tag{4.13}$$

在获得 r 值之后,有变量 W 在网格面上的值为:

$$W_f = W_P + \frac{1}{2}\psi(r)(\psi_N - \psi_P)$$
 (4.14)

其中 $\psi(r)$ 对应不同的高阶格式,如 vanLeer、Minmod 等。

4.3 为什么 $-\frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot \mathbf{U})\mathbf{I}$ 为体膨胀系数项?

在方程 Eq. (3.80) 中,可压缩流体的 τ 中需要考虑 $-\frac{2}{3}\mu(\nabla\cdot\mathbf{U})\mathbf{I}$ 。其中的 $-\frac{2}{3}\mu$ 也经常被称之为体膨胀/压缩粘度。这是因为 $-\frac{2}{3}\mu(\nabla\cdot\mathbf{U})\mathbf{I}$ 可以转换为密度相关变量:

$$-\frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot \mathbf{U})\mathbf{I} = -\frac{2}{3}\mu\left(\frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{D}\rho}{\mathrm{D}t}\right)\mathbf{I}$$
(4.15)

可见, $\frac{1}{\rho} \frac{D\rho}{Dt}$ 为密度的物质导数项,从第3.3.3节可知,其表示拉格朗日框架下密度小微团的变化率。因此,即跟体膨胀相关。

4.4 什么是应力的 Deviatoric 与 Hydrostatic 部分?

在 CFD 中,通常要将二阶张量 σ 的 deviatoric 部分和 hydrostatic 部分做区分,如:

$$\sigma = \sigma_{dev} + \sigma_{hud} \tag{4.16}$$

用下面这个例子可以表明 σ_{dev} 和 σ_{hyd} 的计算关系。如果

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} 50 & 30 & 20 \\ 30 & -20 & -10 \\ 20 & -10 & 10 \end{pmatrix} \tag{4.17}$$

则正应力 hydrostatic 部分可以这样计算:

$$\sigma_{hyd} = \frac{50 - 20 + 10}{3} = 13.3 \tag{4.18}$$

$$\sigma_{hyd} = \begin{pmatrix} 13.3 & 0 & 0\\ 0 & 13.3 & 0\\ 0 & 0 & 13.3 \end{pmatrix} \tag{4.19}$$

偏应力 deviatoric 部分可以这样计算:

$$\sigma_{dev} = \sigma - \sigma_{hyd} = \begin{pmatrix} 36.7 & 30 & 20\\ 30 & -33.3 & -10\\ 20 & -10 & -3.3 \end{pmatrix}$$
(4.20)

可以看出, σ_{dev} 的迹是 0,也就是说,对于一个二阶张量的偏应力部分,其正应力部分为 0。

二阶张量 σ 的正应力与偏应力部分也可以这样推导:

$$\sigma_{hyd} = \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}) \mathbf{I} \tag{4.21}$$

$$\sigma_{dev} = \sigma - \sigma_{hyd} = \sigma - \frac{1}{3} tr(\sigma) \mathbf{I}$$
 (4.22)

为什么要将二阶张量分为正应力部分与偏应力部分,这是因为压力 p 可以看做一个正应力部分,剪切应力 τ 可以看做是偏应力部分,二者可以构成一个整体的二阶张量 σ :

$$\sigma = \sigma - \frac{1}{3} \operatorname{tr}(\sigma) \mathbf{I} + \frac{1}{3} \operatorname{tr}(\sigma) \mathbf{I}$$
(4.23)

令

$$-p\mathbf{I} = \frac{1}{3}\text{tr}(\boldsymbol{\sigma})\mathbf{I} \tag{4.24}$$

有:

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \left(\boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{3}\mathrm{tr}(\boldsymbol{\sigma})\mathbf{I}\right) = \boldsymbol{\sigma}_{hyd} + \boldsymbol{\sigma}_{dev}$$
 (4.25)

在这种情况下,动量方程右侧可以理解为:

$$-\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \tag{4.26}$$

一些教材偏向使用 $\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}$ 来进行讲解,其中 $\boldsymbol{\sigma}$ 被称之为<u>柯西应力张量</u>。本笔记则采用 $-\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}$,因为其更有易于理解。

4.5 如何理解雷诺应力项中的 $\frac{2}{3}\rho k$ I?

由关于方程 Eq. (3.80) 中的讨论可知, 在未考虑雷诺分解之前, 有:

$$\tau = \mu(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^{\mathrm{T}}) - \frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot \mathbf{U})\mathbf{I}$$
(4.27)

考虑雷诺平均类(Reynolds Averaged Navier Stokes, RANS)模型,对对流项进行雷诺平均后,会出现雷诺应力项:

$$\overline{\nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U})} = \nabla \cdot (\overline{\rho} \overline{\mathbf{U}} \overline{\mathbf{U}}) + \nabla \cdot (\overline{\rho} \overline{\mathbf{U}} \overline{\mathbf{U}}')$$
(4.28)

其中的 $\overline{\rho}\overline{U'U'}$ 通常被称之为雷诺应力项²,其为一个二阶张量。在线性涡粘类湍流模型中,雷诺应力项可通过 Bousinessq 近似来进行封闭。考虑湍流动能的定义:

$$\overline{\rho}k = \frac{1}{2}\overline{\rho}\overline{\mathbf{U}'\cdot\mathbf{U}'} = \frac{1}{2}\mathrm{tr}(\overline{\rho}\overline{\mathbf{U}'\mathbf{U}'}) \tag{4.29}$$

雷诺应力项通常被分为正应力部分与偏应力部分:

$$\overline{\rho}\overline{\mathbf{U}'\mathbf{U}'} = \overline{\rho}\overline{\mathbf{U}'\mathbf{U}'} - \frac{1}{3}\operatorname{tr}\left(\overline{\rho}\overline{\mathbf{U}'\mathbf{U}'}\right)\mathbf{I} + \frac{1}{3}\operatorname{tr}\left(\overline{\rho}\overline{\mathbf{U}'\mathbf{U}'}\right)\mathbf{I}$$
(4.30)

将方程 Eq. (4.29) 代入到 Eq. (4.30) 有:

$$\overline{\rho}\overline{\mathbf{U}'\mathbf{U}'} = \overline{\rho}\overline{\mathbf{U}'\mathbf{U}'} - \frac{2}{3}\overline{\rho}k\mathbf{I} + \frac{2}{3}\overline{\rho}k\mathbf{I}$$
(4.31)

其中的 $\frac{2}{3}pkI$ 通常与压力 p 组合到一起:

$$\tilde{\overline{p}} = \overline{p} + \frac{2}{3}\overline{\rho}k\mathbf{I} \tag{4.32}$$

随后,方程 Eq. (4.31) 中的 $\overline{\mathbf{U}'\mathbf{U}'}$ $-\frac{2}{3}\overline{\rho}k\mathbf{I}$ 可以继续通过 Bousinessq 近似附加湍流粘度进行模化,将其转化为 $\overline{\mathbf{U}}$ 的方程进而封闭。

4.6 变量有界性

某些传输的变量具备有界的特征,比如体积分数 α 严格的介于 0 和 1 之间,密度则严格的大于 0。在离散的过程中,高阶格式会产生一些越界的解,这会带来收敛问题。考虑波传输方程

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \alpha = 0 \tag{4.33}$$

其中 U 表示传输速度。其解 α 为严格有界的。因此在求解传输方程的时候,方程(4.33)优先选择。但 方程(4.33)为非守恒形式并且不存在通量函数 3 。因此在对方程(4.33)离散求解时候,其通常改写为

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}\alpha) - \alpha \nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \tag{4.34}$$

由于存在对速度的散度,因此解决了通量函数不存在的问题。同时,虽然连续性方程 $\nabla \cdot \mathbf{U} = 0$ 意味着第三项可以忽略,即求解

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}\alpha) = 0 \tag{4.35}$$

但在稳态算法的迭代步中, $\nabla \cdot \mathbf{U} \neq 0$ 。因此,只有求解方程(4.34)才能保证变量的有界。另外,瞬态算法可以保证每一个时间步都收敛($\nabla \cdot \mathbf{U} - 0$ 降低至压力残差以下),因此可以直接求解方程(4.35)。但对于需要有界的变量来讲,只有求解方程(4.34),同时调用有界的离散格式(如 vanLeer 格式)才能保证变量的有界。

上述理论可以通过开源 CFD 软件 OpenFOAM 进行测试和验证,在 OpenFOAM 中的稳态算例中,对流项的离散格式需要添加bounded关键词,例如湍流动能对流项指定为⁴

 $^{^{2}}$ 注意,雷诺应力项在方程右侧为负号: ... = ... - $\nabla \cdot (\rho \overline{\mathbf{U}'\mathbf{U}'})$

 $^{^3}$ 考虑在 i 网络点对 $\mathbf{U} \cdot \nabla \alpha$ 进行离散,在离散时, \mathbf{U} 在 $^i + \frac{1}{2}, i - \frac{1}{2}$ 可以具有不同的值。同时 $^i + \frac{1}{2}, i - \frac{1}{2}$ 上的面积应该也具有不同的值。比如一个进口面积较大,出口面积较小的计算域,必然进口速度小,出口速度大。但若对方程(4.33)直接离散不能体现面积的影响。

⁴tutorials/incompressible/simpleFoam/motoBike

div(phi,k) bounded Gauss upwind;

这意味着求解方程(4.34)的形式。一些瞬态算例,某些变量同样指定为5

div(phi,s) bounded Gauss limitedLinear 1;

这也意味着求解方程(4.34)的形式。某些变量(如速度)则指定为

div(phi,U) Gauss LUST grad(U);

这意味着求解方程(4.35)的形式。其表示并没有对速度进行严格有界处理。对于湍流动能也通过求解方程(4.35)的形式来处理,其有界性通过bound函数来保证。

在实际测试中,相比方程(4.35),方程(4.34)虽然有很大改善,但依然不能严格的保证变量的有界。 在这种情况下,则需要一些更高级的处理方式来进行,如反扩散高阶格式。

4.7 守恒与非守恒、守恒变量与原始变量

间断解对于求解的控制方程与算法来说是一种挑战。在3.5.3节描述了守恒与非守恒方程的转化关系。在3.5.5节讨论了积分形式的控制方程。但为什么他们被称之为守恒形式和非守恒形式? 从物理与数学形式上看他们有什么意义? 方程为什么要区分为积分形式与微分形式? 原始变量与守恒变量在求解上哪一个更优?

从数学角度来讲,如果考虑 x 方向动量的导数,网格如图4.8所示,字母表示网格单元编号,数字表示面编号。对于 B 网格点,对于动量 ρu 这个守恒变量进行有限体积法离散为:

$$\int_{1}^{2} \frac{\partial \rho u}{\partial x} dx = (\rho u)_{2} - (\rho u)_{1} \tag{4.36}$$

对 A, B, C 网格点进行离散并加和有:

$$\int_{0}^{1} \frac{\partial \rho u}{\partial x} dx + \int_{1}^{2} \frac{\partial \rho u}{\partial x} dx + \int_{2}^{3} \frac{\partial \rho u}{\partial x} dx = (\rho u)_{1} - (\rho u)_{0} + (\rho u)_{2} - (\rho u)_{1} + (\rho u)_{3} - (\rho u)_{2}$$

$$= (\rho u)_{3} - (\rho u)_{0} = \int_{0}^{3} \frac{\partial \rho u}{\partial x} dx \quad (4.37)$$

也即不管如何加和,最后只有边界通量的影响,内部点互相约去,即通量永远是守恒的,进来多少,出去多少。相反,对于动量 ρu 这个守恒变量,将其拆分为原始变量 ρu 同时进行有限体积法离散为:

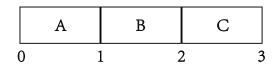


图 4.8: 一维有限体积网格。

$$\int_{1}^{2} \frac{\partial \rho u}{\partial x} dx = \int_{1}^{2} \left(u \frac{\partial \rho}{\partial x} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} \right) dx = \tilde{u}(\rho_{2} - \rho_{1}) + \tilde{\rho}(u_{2} - u_{1})$$
(4.38)

⁵tutorials/incompressible/pisoFoam/LES/pitzDaily

其中的面上的 \tilde{u} , $\tilde{\rho}$ 需要计算而来,不同的格式对应不同的结果。如果定义为网格的平均值,同时对 A,B,C 网格点进行离散并加和有:

$$\int_{0}^{1} \left(u \frac{\partial \rho}{\partial x} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} \right) dx + \int_{1}^{2} \left(u \frac{\partial \rho}{\partial x} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} \right) dx + \int_{2}^{3} \left(u \frac{\partial \rho}{\partial x} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} \right) dx =$$

$$u_{A}(\rho_{1} - \rho_{0}) + \rho_{A}(u_{1} - u_{0}) + u_{B}(\rho_{2} - \rho_{1}) + \rho_{B}(u_{2} - u_{1}) + u_{C}(\rho_{3} - \rho_{2}) + \rho_{C}(u_{3} - u_{2})$$
(4.39)

很明显,方程(4.39)的右边并不能够互相约去,也即为非守恒。

从物理意义来讲,在守恒法则下,守恒变量方程表示的是"真正"守恒的方程,原始变量方程表示的是"虚假"守恒的方程。例如考虑一维欧拉方程,守恒变量方程可以表示为:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u u}{\partial x} = 0$$
(4.40)

将动量方程展开:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u u}{\partial x} = u \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \rho u \frac{\partial u}{\partial x} = 0$$
(4.41)

结合连续型方程,其可以写为原始变量方程:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial \frac{1}{2} u u}{\partial x} = 0$$
(4.42)

对比方程(4.40)与(4.42),可以看出二者都表示守恒法则,不过前者表示质量与动量的守恒,后者表示质量与"速度"的守恒。由于速度并不是守恒的变量,因此方程(4.42)表示的是一种"虚假"守恒的状态。但数学过程是严谨的,那么方程(4.42)是否可以求解呢?答案是可以的,只要解是光滑的。若存在间断,"虚假"守恒的方程会预测不同的结果。

4.8 动理学方程、矩方程与 N-S 方程

正如前言中所指出的, N-S 方程并不是描述流动的最底层的形式。更为底层的数学模型为玻尔兹曼方程。其在不同的领域有不同的称呼。例如在群体平衡模型研究领域,被称之为普适性群体平衡模型,在空气动力学领域被称之为动理学方程,在喷雾燃烧领域被称之为威廉玻尔兹曼方程。三维的玻尔兹曼方程可以写为

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{U}f) + \nabla_{\mathbf{U}} \cdot (\mathbf{A}f) = \mathbb{C}, \tag{4.43}$$

其中 f,即 $f(t, \mathbf{x}, \mathbf{U})$,表示关于气体分子的速度分布函数, \mathbf{U} 表示气体分子的速度, \mathbf{A} 表示受力引起的加速项, \mathbb{C} 表示碰撞项。一维形式的玻尔兹曼方程可以写为

$$\frac{\partial f(u)}{\partial t} + \frac{\partial u f(u)}{\partial x} + \frac{\partial A f(u)}{\partial u} = \mathbb{C}$$
(4.44)

4.9 JACOBIAN 43

其中 u 表示速度的 x 方向分量,A 表示 A 在 x 方向上的分量。如果不考虑加速项与碰撞项,一维玻尔兹曼方程降级为如下形式:

$$\frac{\partial f(u)}{\partial t} + \frac{\partial u f(u)}{\partial x} = 0 \tag{4.45}$$

在这里引入矩的概念,这里讨论的矩即为统计学中的矩。由于 f(u) 为描述空气分子运动的关于速度 u 的概率密度函数,因此对 f(u) 具有矩,且其低阶矩存在一定的物理意义。例如,f(u) 的 0 阶矩表示为密度:

$$m_0 = \int f(u) du \equiv \rho \tag{4.46}$$

f(u) 的 1 阶矩表示为动量:

$$m_1 = \int f(u)u du \equiv \rho \bar{u} \tag{4.47}$$

以及2阶矩:

$$m_2 = \int f(u)u^2 du \equiv \rho \bar{u}\bar{u} \tag{4.48}$$

其中 \bar{u} 表示气体分子运动的平均速度。因此,对方程(4.45)取矩有

$$\partial_t m_0 + \partial_x m_1 = 0$$

$$\partial_t m_1 + \partial_x m_2 = 0$$

$$(4.49)$$

依据矩的定义,方程(4.49)也即

$$\partial_t \rho + \partial_x \rho \bar{u} = 0$$

$$\partial_t \rho \bar{u} + \partial_x \rho \bar{u} \bar{u} = 0$$
(4.50)

方程(4.50)中分别对应连续性方程和无压力无粘性力的动量方程。整个方程系统也被称之为无压力气体动力学方程。在矩方法研究领域也被称之为二阶矩模型 [9]。N-S 方程也可以看做是一种二阶矩模型。无压力气体动力学方程主要可用于描述低温等离子体、宇宙中的稀薄气体等。

4.9 Jacobian

Jacobian 在流体力学中的应用主要涉及到体积微元以及坐标转换。考虑原始坐标系 (α, β, γ) , 在将体积 V_0 投影至新坐标系 (x, y, z) 之后,其体积将会发生变化。Jacobian 矩阵被定义为:

$$\boldsymbol{J} = \frac{\partial(x, y, z)}{\partial(\alpha, \beta, \gamma)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial \alpha} & \frac{\partial x}{\partial \beta} & \frac{\partial x}{\partial \gamma} \\ \frac{\partial y}{\partial \alpha} & \frac{\partial y}{\partial \beta} & \frac{\partial y}{\partial \gamma} \\ \frac{\partial w}{\partial \alpha} & \frac{\partial w}{\partial \beta} & \frac{\partial w}{\partial \gamma} \end{pmatrix}$$
(4.51)

Jacobian 被定义为 Jacobian 矩阵的行列式:

$$J = |\boldsymbol{J}| \tag{4.52}$$

这样,体积变化可以表示为:

$$dV = \frac{\partial(x, y, z)}{\partial(\alpha, \beta, \gamma)} d\alpha d\beta d\beta = J dV_0$$
(4.53)

同时参考方程(3.47)以及速度散度的定义,有:

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = \frac{1}{J} \frac{\mathrm{D}J}{\mathrm{D}t} \tag{4.54}$$

可参考其他资料获取更详细的讨论 [3].

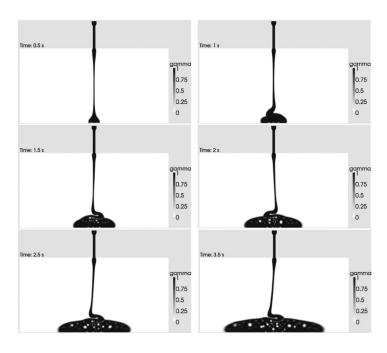


图 4.9: 通过开源 CFD 软件 OpenFOAM 模拟的粘弹性流体两相流 [11]。

4.10 非牛顿流体

上文的讨论均假定流体为牛顿流体,即流体的粘度为常数(剪切应力和形变率的比值为定值),剪切应力越大,形变的速度呈现同比例的变化。也即方程(3.80)中的 μ 为定值。在非牛顿流体中, μ 表示为一个跟时空有关的变量。非牛顿流体在日常生活中非常常见,如果酱、洗洁精、血液、泥浆、蛋清、等。举例,淀粉溶液在轻轻搅动的时候较易,快速搅动的时候较难。这是因为淀粉溶液的粘度和剪切应力呈现非线性的关系。剪切应力越大,粘度越高,形变率越慢,越难以搅动。非牛顿流体可以按照以下标准进行区分,【剪切变稀流体】的粘度随着剪切应力增加而降低,【剪切增稠流体】的粘度随着剪切应力增加而增加,【宾汉流体】在剪切力小于一定值的情况下,呈现固体的特性,【粘弹性流体】的粘度具备粘性,同时具备固体类似的弹性。

在 CFD 中,牛顿流体的动量方程中的剪切应力 τ 可以通过方程(3.80)转变为 U 项进而封闭。在一些较为简单的非牛顿流体中(如宾汉流体),可以通过将 μ 表示为关于时空的函数进行计算植入。在一些复杂的非牛顿流体中(如粘弹性流体的 Giesekus 模型),则需要植入 τ 的传输方程,然后对其求解散度项中代入到动量方程中进行显性离散计算。

4.11 算子分裂法

CFD 算法中,经常会讨论到算子分裂法。算子分裂的英文解释为 Operator Splitting。对于 CFD 中的方程,有些情况下,按项去求解会比较简单。考虑下面的无量纲方程:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \tag{4.55}$$

在求解过程中,可以按项来处理,先求

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \tag{4.56}$$

在获得解 ϕ^* 后,再求

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \tag{4.57}$$

获得解 ϕ^{**} 。这样求解有一个非常特殊的好处。那就是可以在不同的阶段调用不同的格式。例如在方程 Eq. (4.56) 中,其为一个纯对流方程,可以调用显性迎风高阶格式。在方程 Eq. (4.57) 中,其为一个含有扩散项的时间推进方程,可调用较大时间步的隐性格式。

4.12 laplacian(ϕ) = div(grad(ϕ))?

在 OpenFOAM 中, 扩散项 $\nabla \cdot (\nabla \phi)$ 的植入形式为

fvc::laplacian(psi)

从数学形式来讲, $\nabla \cdot (\nabla \phi)$ 似乎也可以写为

fvc::div(fvc::grad(psi))

然而,方程的连续形式和离散形式有时是不同的。OpenFOAM 创始人 Henry Weller 也表示:

"The consistency issue arises because laplacian uses a compact molecule and grad(div has to use an extended molecule. The only numerically consistent approach is to use the extended molecule for all three terms but then you loose the advantage of the compact molecule for laplacian."

下面我们就证明二者的差异。

若采用拉普拉斯项形式对 $\nabla \cdot (\nabla \phi)$ 进行离散有⁶:

$$\int \nabla \cdot (\nabla \phi) \, dV = \int \nabla \phi d\mathbf{S} = \sum (\nabla \phi)_f \mathbf{S}_f = \sum \underbrace{\left((\nabla \phi)_f \cdot \frac{\mathbf{S}_f}{|\mathbf{S}_f|}\right)}_{\text{snGrad}} \cdot |\mathbf{S}_f|$$
(4.58)

其中 snGrad 项可以调用紧致基架点 (Compact Stencil) 进行离散。

若采用散体梯度的形式对 $\nabla \cdot (\nabla \phi)$ 进行离散有:

$$\int \nabla \cdot (\nabla \phi) \, dV = \int \nabla \cdot \left(\frac{1}{\Delta V} \sum \phi_f \mathbf{S}_f \right) dV = \sum \left(\frac{1}{\Delta V} \sum \phi_f \mathbf{S}_f \right)_f \cdot \mathbf{S}_f \tag{4.59}$$

其中 $\nabla \phi$ 调用 grad (梯度) 离散格式, ∇ · 调用 div (散度) 离散格式, 整体上形成非紧致基架点 (Noncompact Stencil)。

俩种形式的区别在一维形式下更好理解,考虑 $\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial x}$,采用中心格式拉普拉斯形式的离散为

$$\int \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial x} dV = \frac{\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_w - \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_e}{\Delta x} \Delta x \Delta y \Delta z = \frac{\phi_W + \phi_E - 2\phi_P}{\Delta x} \Delta y \Delta z$$
(4.60)

 $^{^{6}/}src/finite Volume/finite Volume/laplacian Schemes/gauss Laplacian Scheme/gauss Laplacian Scheme. Carrier for the finite Volume for the finite Volum$

若采用中心格式散体梯度的形式进行离散有:

$$\int \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial x} dV = \int \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\left(\frac{\phi_W + \phi_P}{2} - \frac{\phi_P + \phi_E}{2}\right) \Delta y \Delta z}{\Delta x \Delta y \Delta z} \right) dV = \int \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\phi_W - \phi_E}{2\Delta x} \right) dV \\
= \frac{\phi_{WW} + \phi_{EE} - 2\phi_P}{4\Delta x} \Delta y \Delta z \quad (4.61)$$

很明显,方程(4.60)调用的为相邻网格点,方程(4.61)调用了更远的网格点,有可能会引起震荡。

同时,正如 Henry Weller 所说,在 N-S 方程中,压力方程存在压力 p 的拉普拉斯项,只有其采用拉普拉斯形式进行离散的时候,才能保证调用紧致基架点防止震荡。

4.13 -fvc::flux(-phir,..) = fvc::flux(phir,..)?

OpenFOAM 中可以使用flux()函数计算通量。举例,对于 $\phi_f \alpha_f = \mathbf{U}_f \cdot \mathbf{S}_f \alpha_f$,可通过下述代码计算通量

- phi = fvc::interpolate(U) & mesh.Sf();
- phiAlpha = fvc::flux(phi,alpha);

在 interFoam 中,存在压面压缩项 $\nabla \cdot \left(\alpha \beta c |\mathbf{U}| \frac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha|}\right)$ 。注意其中 $\beta = 1 - \alpha$ 。现在将其改写为 $\nabla \cdot (\mathbf{U}_r \alpha \beta)$,其中 \mathbf{U}_r 表示压缩速度。界面压缩项的离散形式为

fvc::flux(-fvc::flux(-phir, beta, upwind), alpha, upwind)

在这里需要讨论的是这些负号,在调用合适的离散格式的时候,可以保证有界性。例如,考虑一维的压缩项,其可以简写为 $\partial u_r \alpha \beta / \partial x$ 。考虑网格单元面,按照上述代码,对这一项中的分子部分进行通量计算可以写为 $u_{r,f} \alpha_{\text{upwind}} \beta_{\text{downwind}}$,其原因下述,考虑下段代码:

-fvc::flux(-phir, beta, upwind)

flux()函数内的负号表示对 β 依据负的通量的方向进行迎风离散,即下风格式。由于flux()函数内添加的负号不仅改变了离散格式的选取方向,还改变了通量的正负,因此在flux()函数前应该添加负号将其进行还原。这段代码在数学上可以理解为 $-(-u_{r,f}\beta_{\text{downwind}})$ 。然后, α 依据 $-(-u_{r,f}\beta_{\text{downwind}})$ 进行离散。由于 $-(-u_{r,f}\beta_{\text{downwind}})$ 并没有改变方向,因此 α 迎风离散。

考虑下面三个网格单元,界面压缩项速度的方向源自于 α 的梯度。对于图示的 α 值,相应的速度方向倾向于将中间网格单元的值"挤压"到相邻网格,这也是界面压缩相存在的意义(使得界面更加尖锐)。然而,对于图示的 α 场,如果进行压缩,同时对 α 和 β 调用迎风格式:即 b 网格面的 α , β 均为

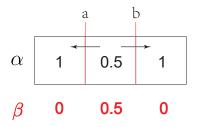


图 4.10: 界面压缩项网格示意图。 a,b 表示网格单元面。

0.5,会导致 b 面存在相应的界面压缩通量,导致中心处网格单元的值小于 0.5 (合理的),同时周围网格单元的 α 值大于 1。后者会导致越界,并不符合物理。a 面同理。

相反,如果对 α 调用迎风格式, β 调用下风格式,则 b 网格面的 α , β 分别为 0.5 和 0,进而界面 压缩通量为 0,越界行为可以避免。

4.14 pEqn.flux()?

OpenFOAM 中的pEqn.flux()主要用于计算通量。例如对于下述方程:

$$\nabla \cdot \underline{\rho^n \mathbf{Hby} \mathbf{A}^n} p^{n+1} - \nabla \cdot \left(\frac{\underline{\rho^n}}{\underline{A^n}} \nabla p^{n+1} \right) = 0$$
 (4.62)

若对其进行隐性离散, 代码为

fvm::div(phiHbyA, p)
fvm::laplacian(rhorAU, p)

则pEqn.flux()即为方程4.62中的下划线部分:

$$flux() = \rho^n \mathbf{Hby} \mathbf{A}^n \cdot \mathbf{S}_f - \frac{\rho^n}{A^n} \nabla p^{n+1} \cdot \mathbf{S}_f.$$
 (4.63)

再例如,对于下述方程:

$$\nabla \cdot \left(\frac{\rho^n}{A^n} \nabla p^{n+1}\right) = \nabla \cdot \rho^n \mathbf{Hby} \mathbf{A}^n \tag{4.64}$$

若对其进行隐性离散,代码为

fvm::laplacian(rhorAU, p) = fvc::div(phiHbyA)

则pEqn.flux()即为方程4.64中的下划线部分:

$$flux() = \frac{\rho^n}{A^n} \nabla p^{n+1} \cdot \mathbf{S}_f. \tag{4.65}$$

可见, flux()函数主要提取隐性离散 $\nabla \cdot$ 算符内的运算。

4.15 fvc::reconstruct()?

fvc::reconstruct()函数主要用于处理动量方程中源项。例如表面张力项、压力项、浮力项、界面动量交换项等。此函数返回的场的变量要比输入的场变量高一阶。例如,若对标量进行 reconstruct,则得到矢量场,若对矢量做 reconstruct,则得到二阶张量场。现存一些讨论fvc::reconstruct()的文献很有意义,但并不完善[1,2]。本小节详述为什么需要fvc::reconstruct()以及其数学形式。

fvc::reconstruct()实现了将定义在网格单元面上的量重组到体心的过程,即 reconstruct。结合代码,例如对于速度,这种重组的数学过程为⁷:

$$\mathbf{U}_{\mathrm{P}} = \frac{\sum \frac{\mathbf{S}_{f}}{|\mathbf{S}_{f}|} \underbrace{(\mathbf{S}_{f} \cdot \mathbf{U}_{f})}_{input}}{\sum \frac{\mathbf{S}_{f}}{|\mathbf{S}_{f}|} \otimes \mathbf{S}_{f}}$$
(4.66)

即:

$$\left(\sum \mathbf{n}_f \otimes \mathbf{S}_f\right) \cdot \mathbf{U}_{\mathrm{P}} = \sum \left(\mathbf{n}_f \otimes \mathbf{S}_f\right) \cdot \mathbf{U}_{\mathrm{P}} = \sum \mathbf{n}_f \left(\underbrace{\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{U}_f}_{input}\right)$$
(4.67)

⁷src/finiteVolume/finiteVolume/fvc/fvcReconstruct.C

其中 \mathbf{n}_f 表示网格单元面单位矢量, \mathbf{U}_P 表示网格单元体心的速度, \mathbf{U}_f 表示网格单元面心的速度。input 表示输入的场,在方程(4.66)中则输入通量场 $\phi_f = \mathbf{S}_f \cdot \mathbf{U}_f$ 。需要注意的是, $\mathbf{n}_f \otimes \mathbf{S}_f$ 为一个二阶张量场。方程(4.67)可以继续整理为8:

$$\sum (\mathbf{n}_f \otimes \mathbf{S}_f) \cdot \mathbf{U}_{P} = \sum \mathbf{n}_f (\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{U}_{P}) = \sum \mathbf{n}_f \phi_f$$
 (4.68)

略去其中的 \mathbf{n}_f 有下列等式:

$$\sum \mathbf{U}_{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{S}_f = \sum \phi_f \tag{4.69}$$

方程(4.69)可以更清晰的理解为fvc::reconstruct()函数在给定面通量(右侧的 ϕ_f)的情况下,重组的体心速度场(左侧的 \mathbf{U}_P)。由于矢量并不能求逆,方程(4.69)虽然更易理解但难以植入,因此代码中植入的为方程(4.66).

之所以进行fvc::reconstruct()函数的原因在于可以防止数值震荡。举例说明:对于压力梯度项 ∇p ,一种离散方法是将其写为fvc::grad(p),其数学形式为grad(p):

$$\frac{1}{\Delta V} \int \nabla p dV = \frac{1}{\Delta V} \int p d\mathbf{S} = \frac{1}{\Delta V} \sum p_f \mathbf{S}_f$$
 (4.70)

在第4.12节的讨论中可以看出,方程(4.70)的离散形式调用非紧致基架点,跨越两个网格点的值,因此可能会产生数值震荡。

 ∇p 另外一种离散形式即通过fvc::reconstruct()的形式组建。对应的代码为

```
1 fvc::reconstruct
2 (
3   fvc::snGrad(p)*mesh.magSf()
4 )
```

相应的数学形式为

$$\sum \nabla p_{P} \cdot \mathbf{S}_{f} = \sum (\nabla p)_{f} \cdot \frac{\mathbf{S}_{f}}{|\mathbf{S}_{f}|} |\mathbf{S}_{f}|$$
(4.71)

方程(4.71)左侧的 ∇p_P 为fvc::reconstruct()函数返回的变量。参考第4.12节的讨论,可以看出方程(4.71)右侧的离散调用紧致基架点,可以防止数值震荡。总体来说,fvc::reconstruct()函数结合面法向梯度,将普通的梯度离散导致的数值震荡抹平,即为fvc::reconstruct()函数存在的意义。

4.16 OpenFOAM 中的边界条件

有限体积法中边界条件的作用通过改变稀疏矩阵的系数与源项来进行。考虑图4.8所示的一维网格单元,结合典型的无量纲化一维传输方程(各项系数均为一):

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right) = S \tag{4.72}$$

对 A 网格点讲行离散有10:

$$\frac{\phi_A^{t+\Delta t} - \phi_A}{\Delta t} + \frac{\phi_A - \phi_0}{0.5\Delta x} - \frac{\frac{\phi_B - \phi_A}{\Delta x} - \frac{\partial \phi_0}{\partial x}}{\Delta x} = S$$
 (4.73)

⁸基本操作: $(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}) \cdot \mathbf{c} = \mathbf{a}(\mathbf{b} \cdot \mathbf{c})$

⁹在 OpenFOAM 中,虽然要对动量方程做体积分,但除了时间离散,诸如对流、散度、梯度等在离散时均除掉了网格体积。

 $^{^{10}}$ 假定正向迎风格式: $\phi_1 = \phi_A$

可以看出边界值 ϕ_0 (边界条件) 对时间项与源项 S 并无影响。大部分情况下,边界条件可以表示为固定值边界条件与零法向梯度边界条件的组合形式。因此,分析固定值边界条件与零法向梯度边界条件是理解边界条件植入的必要条件。

在分析各项之前,在这里要说明的是在 OpenFOAM 中,对流项边界条件对矩阵对角线系数的影响通过valueInternalCoeffs进行更新¹¹,对矩阵源项的影响通过valueBoundaryCoeffs进行更新。扩散项边界条件对矩阵对角线系数的影响通过gradientInternalCoeffs进行更新,对矩阵源项的影响通过gradientBoundaryCoeffs进行更新。

对于对流项,固定值边界条件值 ϕ_0 为固定值,因此,其并不改变 ϕ_A 的对角系数valueInternalCoeffs。同时, $\frac{\phi_0}{\Delta x}$ 将进入离散矩阵的源项部分,改变valueBoundaryCoeffs。若其为零法向梯度边界条件,则 $\phi_0 = \phi_A$,在离散方程中,对流项变为 $\frac{\phi_1 - \phi_1}{\Delta x}$,因此,其改变 ϕ_A 的对角系数valueInternalCoeffs,但 并没有项进入矩阵源项部分,因此矩阵源项valueBoundaryCoeffs不变。

类似的,对于扩散项,若其为固定值边界条件,有:

$$\frac{\frac{\partial \phi_0}{\partial x}}{\Delta x} = \frac{\phi_A - \phi_0}{d\Delta x} \tag{4.74}$$

因此,固定值边界条件将改变矩阵对角线系数gradientInternalCoeffs(乘以 $\frac{1}{d}$) 12 ,同时改变矩阵源项gradientBoundaryCoeffs($\frac{\phi_0}{d\Delta x}$)。若其为零法向梯度边界条件,则 $\frac{\partial \phi_0}{\partial x}=0$,则其不改变对角系数也不改变源项。

 $^{^{11}}$ 注意区分控制方程的离散形式和连续形式,方程 $^{4.72}$ 为连续形式,对其进行有限体积法离散之后,每个网格点均具备方程 $^{4.73}$ 的形式,由于存在大量网格点,若干个方程 $^{4.73}$ 组成稀疏矩阵系统,通常写为 $a_P\phi_P+\sum a_N\phi_N=S$,这里的 S 即为矩阵源项,其不同于方程 $^{4.72}$ 中的 S。 a_P 为矩阵对角线系数。

¹²1/d 为 this->patch().deltaCoeffs()

参考文献

- [1] About fvc::reconstruct (1). https://www.jianguoyun.com/p/DeD70AkQ9s3ZBhiAtPQC. Accessed: 2020-03-12.
- [2] About fvc::reconstruct (2). https://www.jianguoyun.com/p/DVqidAUQ9s3ZBhiBtPQC. Accessed: 2020-03-12.
- [3] Change of variables in multiple integrals (jacobians). https://math.libretexts.org/Courses/Monroe_Community_College/MTH_212_Calculus_III/Chapter_14%3A_Multiple_Integration/14.7%3A_Change_of_Variables_in_Multiple_Integrals_(Jacobians). Accessed: 2022-09-20.
- [4] Turbulent boundary layer (dns). https://www.youtube.com/watch?v=Wr984E0mNaY&t=12s. Accessed: 2020-11-05.
- [5] G.A. Bird. Molecular gas dynamics. NASA STI/Recon Technical Report A, 76, 1976.
- [6] D. Bouris and G. Bergeles. 2D LES of vortex shedding from a square cylinder. <u>Journal of Wind</u> Engineering and Industrial Aerodynamics, 80:31–46, 1999.
- [7] M. Breuer. Large eddy simulation of the subcritical flow past a circular cylinder: numerical and modeling aspects. International Journal For Numerical Methods in Fluids, 28:1281–1302, 1998.
- [8] W.L. Briggs, V.E. Henson, and S.F. McCormick. A multigrid tutorial. SIAM, 2000.
- [9] C. Chalons, D. Kah, and M. Massot. Beyond pressureless gas dynamics: quadrature-based velocity moment models. <u>arXiv preprint arXiv:1011.2974</u>, 2010.
- [10] M.S. Darwish and F. Moukalled. Tvd schemes for unstructured grids. <u>International Journal of</u> heat and mass transfer, 46:599–611, 2003.
- [11] J.L. Favero, A.R. Secchi, N.S.M. Cardozo, and H. Jasak. Viscoelastic fluid analysis in internal and in free surface flows using the software OpenFOAM. Computers & Chemical Engineering, 34:1984–1993, 2010.
- [12] J.H. Ferziger, M. Perić, and R.L. Street. <u>Computational methods for fluid dynamics</u>, volume 3. Springer, 2002.

52 参考文献

[13] Z. Gao, D. Li, A. Buffo, W. Podgórska, and D.L. Marchisio. Simulation of droplet breakage in turbulent liquid–liquid dispersions with CFD-PBM: Comparison of breakage kernels. <u>Chemical</u> Engineering Science, 142:277–288, 2016.

- [14] H. Jasak. Error analysis and estimation for the finite volume method with applications to fluid flows. 1996.
- [15] C.K.G. Lam and K. Bremhorst. A modified form of the k- ε model for predicting wall turbulence. Journal of Fluid Engineering, 103:456–460, 1981.
- [16] R.J. LeVeque. Finite volume methods for hyperbolic problems. Cambridge university press, 2002.
- [17] D.L. Marchisio and R.O. Fox. <u>Computational models for polydisperse particulate and multiphase</u> systems. Cambridge University Press, 2013.
- [18] E. Roohi, A.P. Zahiri, and M. Passandideh-Fard. Numerical simulation of cavitation around a two-dimensional hydrofoil using VOF method and LES turbulence model. <u>Applied Mathematical</u> Modelling, 37:6469–6488, 2013.
- [19] H. Struchtrup. Macroscopic transport equations for rarefied gas flows. Springer, 2005.
- [20] D.C. Wilcox. Turbulence modeling for CFD. DCW industries La Canada, CA, 1998.
- [21] K. Xu. A gas-kinetic BGK scheme for the Navier–Stokes equations and its connection with artificial dissipation and Godunov method. Journal of Computational Physics, 171:289–335, 2001.
- [22] S. Zhang and X. Zhao. General formulations for Rhie-Chow interpolation. In <u>Heat Transfer</u> Summer Conference, volume 46911, pages 567–573, 2004.
- [23] S. Zhang, X. Zhao, and S. Bayyuk. Generalized formulations for the Rhie–Chow interpolation. Journal of Computational Physics, 258:880–914, 2014.
- [24] 同济大学数学系. 高等数学. 高等教育出版社, 2007.
- [25] 宇波等. 数值传热学实训. 科学出版社, 2018.
- [26] 约翰. 安德森. 计算流体力学基础及其应用. 机械工业出版社, 2007.

附录: OpenFOAM 模型速查

RANS 湍流模型¹³

kEpsilon

$$\begin{split} \frac{\partial \alpha \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\alpha \rho \mathbf{U} \varepsilon \right) - \nabla \cdot \left(\alpha \rho D_{\varepsilon} \nabla \varepsilon \right) &= C_{1} \alpha \rho G \frac{\varepsilon}{k} - \left(\left(\frac{2}{3} C_{1} - C_{3,RDT} \right) \alpha \rho (\nabla \cdot \mathbf{U}) \varepsilon \right) - C_{2} \alpha \rho \frac{\varepsilon}{k} \varepsilon + S_{\varepsilon} \\ \frac{\partial \alpha \rho k}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\alpha \rho \mathbf{U} k \right) - \nabla \cdot \left(\alpha \rho D_{k} \nabla k \right) &= \alpha \rho G - \frac{2}{3} \alpha \rho (\nabla \cdot \mathbf{U}) k - \alpha \rho \frac{\varepsilon}{k} k + S_{k} \\ G &= \nu_{t} \left(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^{T} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{U}) \mathbf{I} \right) : \nabla \mathbf{U}, \nu_{t} = C_{\mu} \frac{k^{2}}{\epsilon}, C_{\mu} = 0.09, C_{1} = 1.44, C_{2} = 1.92, C_{3,RDT} = 0 \\ \sigma_{k} &= 1, \sigma_{\varepsilon} = 1.3, D_{k} = \frac{\nu_{t}}{\sigma_{k}} + \nu, D_{\varepsilon} = \frac{\nu_{t}}{\sigma_{\varepsilon}} + \nu \end{split}$$

RNGkEpsilon

$$\begin{split} \frac{\partial \alpha \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \rho \mathbf{U} \varepsilon) - \nabla \cdot (\alpha \rho D_{\varepsilon} \nabla \varepsilon) &= (C_1 - R) \, \alpha \rho G \frac{\varepsilon}{k} - \left(\left(\frac{2}{3} C_1 - C_{3,RDT} \right) \alpha \rho \nabla \cdot \mathbf{U} \varepsilon \right) - C_2 \alpha \rho \frac{\varepsilon}{k} \varepsilon + S_{\varepsilon} \\ \frac{\partial \alpha \rho k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \rho \mathbf{U} k) - \nabla \cdot (\alpha \rho D_k \nabla k) &= \alpha \rho G - \frac{2}{3} \alpha \rho (\nabla \cdot \mathbf{U}) k - \alpha \rho \frac{\epsilon}{k} k + S_k \\ S_2 &= \left(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{U}) \mathbf{I} \right) : \nabla \mathbf{U}, G = \nu_t S_2, \eta = \frac{\sqrt{|S_2|} k}{\varepsilon}, R = \frac{\eta \left(-\eta / \eta_0 + 1 \right)}{\beta \eta^3 + 1}, \nu_t = C_{\mu} \frac{k^2}{\epsilon} \\ C_{\mu} &= 0.0845, C_1 = 1.42, C_2 = 1.68, \eta_0 = 4.38, C_{3,RDT} = 0, \sigma_k = 0.71942, \sigma_{\varepsilon} = 0.71942, \beta = 0.012 \\ D_k &= \frac{\nu_t}{\sigma_k} + \nu, D_{\varepsilon} = \frac{\nu_t}{\sigma} + \nu \end{split}$$

realizableKE

$$\frac{\partial \alpha \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \rho \mathbf{U} \varepsilon) - \nabla \cdot (\alpha \rho D_{\varepsilon} \nabla \varepsilon) = C_{1} \alpha \rho \sqrt{S_{2}} \varepsilon - \frac{C_{2} \alpha \rho \varepsilon}{k + \sqrt{\nu \varepsilon}} \varepsilon + S_{\varepsilon}$$

$$\frac{\partial \alpha \rho k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \rho \mathbf{U} k) - \nabla \cdot (\alpha \rho D_{k} \nabla k) = \alpha \rho G - \frac{2}{3} \alpha \rho \nabla \cdot \mathbf{U} k - \alpha \rho \frac{\epsilon}{k} k + S_{k}$$

$$S_{2} = 2 \left| \frac{\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^{T}}{2} - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \mathbf{U}) \mathbf{I} \right|^{2}, \eta = \frac{\sqrt{S_{2}} k}{\varepsilon}, G = \nu_{t} \left(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^{T} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{U}) \mathbf{I} \right) : \nabla \mathbf{U}$$

$$\mathbf{S} = \frac{\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^{T}}{2} - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \mathbf{U}) \mathbf{I}, W = \frac{2\sqrt{2} ((\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}) : \mathbf{S})}{S_{2}^{3/2}}, \phi_{s} = \frac{1}{3} \operatorname{acos} \left(\min \left(\max \left(6^{1/2} W, -1 \right), 1 \right) \right)$$

$$A_{s} = 6^{1/2} \operatorname{cos} \phi_{s}, C_{1} = \max \left(\frac{\eta}{5 + \eta}, 0.43 \right), U_{s} = \left(\frac{S_{2}}{2} + \left| \frac{\nabla \mathbf{U} - \nabla \mathbf{U}^{T}}{2} \right|^{2} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$A_{0} = 4, C_{2} = 1.9, \sigma_{k} = 1, \sigma = 1.2, D_{k} = \frac{\nu_{t}}{\sigma_{k}} + \nu, D_{\varepsilon} = \frac{\nu_{t}}{\sigma} + \nu, \nu_{t} = \left(A_{0} + \frac{A_{s} U_{s} k}{\varepsilon} \right)^{-1}$$

¹³src/TurbulenceModels/turbulenceModels/RAS,本节所有模型均从属于 OpenFOAM-7.0 版本

LaunderSharmaKE

$$\begin{split} \frac{\partial \alpha \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\alpha \rho \mathbf{U} \varepsilon \right) - \nabla \cdot \left(\alpha \rho D_{\varepsilon} \nabla \varepsilon \right) &= C_{1} \alpha \rho G \frac{\varepsilon}{k} - \left(\left(\frac{2}{3} C_{1} - C_{3,RDT} \right) \alpha \rho \nabla \cdot \mathbf{U} \varepsilon \right) - C_{2} f_{2} \alpha \rho \frac{\varepsilon}{k} \varepsilon + \alpha \rho E + S_{\varepsilon} \\ \frac{\partial \alpha \rho k}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\alpha \rho \mathbf{U} k \right) - \nabla \cdot \left(\alpha \rho D_{k} \nabla k \right) &= \alpha \rho G - \frac{2}{3} \alpha \rho \nabla \cdot \mathbf{U} k - \alpha \rho \frac{\epsilon + D}{k} k + S_{k} \\ G &= \nu_{t} \left(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^{T} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{U}) \mathbf{I} \right) : \nabla \mathbf{U}, E = 2\nu \nu_{t} \left| \nabla \nabla (\mathbf{U}) \right|^{2}, f_{2} = 1 - 0.3 \exp \left(- \min \left(\left(\frac{k^{2}}{\nu \varepsilon} \right)^{2}, 50 \right) \right) \\ D &= 2\nu \left| \nabla (\sqrt{k}) \right|^{2}, f_{\mu} = \exp \left(\frac{-3.4}{\left(1 + \frac{k^{2}}{50\nu \varepsilon} \right)^{2}} \right), \nu_{t} = C_{\mu} f_{\mu} \frac{k^{2}}{\varepsilon} \\ C_{\mu} &= 0.09, C_{1} = 1.44, C_{2} = 1.92, C_{3,RDT} = 0, \sigma_{k} = 1, \sigma_{\varepsilon} = 1.3, D_{k} = \frac{\nu_{t}}{\sigma_{k}} + \nu, D_{\varepsilon} = \frac{\nu_{t}}{\sigma_{\varepsilon}} + \nu \end{split}$$

LRR

$$\begin{split} \frac{\partial \alpha \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \rho \mathbf{U} \varepsilon) - \nabla \cdot (\alpha \rho \mathbf{D}_{\varepsilon,eff} \nabla \varepsilon) &= C_{\varepsilon,1} \alpha \rho G \frac{\varepsilon}{k} - C_{\varepsilon,2} \alpha \rho \frac{\varepsilon}{k} \varepsilon \\ \frac{\partial \alpha \rho \mathbf{R}}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \rho \mathbf{U} \mathbf{R}) - \nabla \cdot (\alpha \rho \mathbf{D}_{\mathbf{R},eff} \nabla \mathbf{R}) + C_1 \alpha \rho \frac{\varepsilon}{k} \mathbf{R} &= \alpha \rho \mathbf{P} - \left(\frac{2}{3} (1 - C_1) \mathbf{I}\right) \alpha \rho \varepsilon - C_2 \alpha \rho \left(\mathbf{P} - \frac{1}{3} \text{tr}(\mathbf{P}) \mathbf{I}\right) \\ \mathbf{P} &= -(\mathbf{R} \cdot \nabla \mathbf{U} + (\mathbf{R} \cdot \nabla \mathbf{U})^T), k = 0.5 \left(\mathbf{R}_{xx} + \mathbf{R}_{yy} + \mathbf{R}_{zz}\right), G = 0.5 |\mathbf{P}_{xx} + \mathbf{P}_{yy} + \mathbf{P}_{zz}| \\ \mathbf{D}_{\varepsilon,eff} &= C_{\varepsilon} \frac{k}{\varepsilon} \mathbf{R} + \nu \mathbf{I}, \mathbf{D}_{\mathbf{R},eff} &= C_{s} \frac{k}{\varepsilon} \mathbf{R} + \nu \mathbf{I} \\ C_{\mu} &= 0.09, C_{1} = 1.8, C_{2} = 0.6, C_{\varepsilon,1} = 1.44, C_{\varepsilon,2} = 1.92, C_{s} = 0.25, C_{\varepsilon} = 0.15, \end{split}$$

SSG

$$\begin{split} \frac{\partial \alpha \rho \mathbf{R}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\alpha \rho \mathbf{U} \mathbf{R} \right) - \nabla \cdot \left(\alpha \rho \mathbf{D}_{\mathbf{R},eff} \nabla \mathbf{R} \right) + \left(\frac{C_1 \varepsilon + C_{1,s} G}{2} \frac{\alpha \rho}{k} \right) \mathbf{R} \\ &= \alpha \rho \mathbf{P} - \left(\left(\left(2 - C_1 \right) \varepsilon - C_{1,s} G \right) \alpha \rho \right) \frac{1}{3} \mathbf{I} + C_2 \alpha \rho \varepsilon \left(\mathbf{b} \cdot \mathbf{b} - \frac{1}{3} \mathrm{tr}(\mathbf{b} \cdot \mathbf{b}) \mathbf{I} \right) + \alpha \rho k \left(C_3 - C_{3,s} |\mathbf{b}| \right) \left(\mathbf{S} - \frac{1}{3} \mathrm{tr}(\mathbf{S}) \mathbf{I} \right) \\ &\quad + C_4 \alpha \rho k \left(\mathbf{b} \cdot \mathbf{S} + (\mathbf{b} \cdot \mathbf{S})^T - \frac{2}{3} \mathrm{tr}(\mathbf{b} \cdot \mathbf{S}) \mathbf{I} \right) + C_5 \alpha \rho k \left(\mathbf{b} \cdot \cdot + (\mathbf{b} \cdot \cdot)^T \right) \\ &\quad \frac{\partial \alpha \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\alpha \rho \mathbf{U} \varepsilon \right) - \nabla \cdot \left(\alpha \rho \mathbf{D}_{\varepsilon,eff} \nabla \varepsilon \right) = C_{\varepsilon,1} \alpha \rho G \frac{\varepsilon}{k} - C_{\varepsilon,2} \alpha \rho \frac{\varepsilon}{k} \varepsilon \\ &\mathbf{P} = - (\mathbf{R} \cdot \nabla \mathbf{U} + (\mathbf{R} \cdot \nabla \mathbf{U})^T), k = 0.5 \left(\mathbf{R}_{xx} + \mathbf{R}_{yy} + \mathbf{R}_{zz} \right), \quad = \frac{\nabla \mathbf{U} - \nabla \mathbf{U}^T}{2}, \mathbf{S} = \frac{\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T}{2} \\ &\mathbf{b} = \frac{\mathbf{R} - \frac{1}{3} \mathrm{tr}(\mathbf{R}) \mathbf{I}}{2k}, G = 0.5 |\mathbf{P}_{xx} + \mathbf{P}_{yy} + \mathbf{P}_{zz}|, \mathbf{D}_{\varepsilon,eff} = C_\varepsilon \frac{k}{\varepsilon} \mathbf{R} + \nu \mathbf{I}, \mathbf{D}_{\mathbf{R},eff} = C_s \frac{k}{\varepsilon} \mathbf{R} + \nu \mathbf{I} \\ &\quad C_\mu = 0.09, C_1 = 3.4, C_{1,s} = 1.8, C_2 = 4.2, C_3 = 0.8, C_{3,s} = 1.3 \\ &\quad C_4 = 1.25, C_5 = 0.4, C_{\varepsilon,1} = 1.44, C_{\varepsilon,2} = 1.92, C_s = 0.25, C_\varepsilon = 0.15 \end{split}$$

SpalartAllmaras

$$\frac{\partial \alpha \rho \tilde{\nu}}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \rho \mathbf{U} \tilde{\nu}) - \nabla \cdot (\alpha \rho D_{\tilde{\nu}} \nabla \tilde{\nu}) - \frac{C_{b2}}{\sigma_{\nu_t}} \alpha \rho |\nabla \tilde{\nu}|^2 = C_{b1} \alpha \rho \tilde{\nu} \tilde{S} - \frac{C_{w1} \alpha \rho f_w(\tilde{S}) \tilde{\nu}}{y^2} \tilde{\nu}$$

$$f_w(\tilde{S}) = g \left(\frac{1 + C_{w3}^6}{g^6 + C_{w3}^6}\right)^{\frac{1}{6}}, g = r + C_{w2} \left(r^6 - r\right), \chi = \frac{\tilde{\nu}_t}{\nu}, \Omega = \sqrt{2} \left|\frac{\nabla \mathbf{U} - \nabla \mathbf{U}^T}{2}\right|, \nu_t = \tilde{\nu}_t \frac{\chi^3}{\chi^3 + C_{v1}^3}$$

$$\tilde{S} = \max \left(\Omega + \frac{\left(1 - \frac{\chi}{1 + \chi \frac{\chi^3}{\chi^3 + C_{v1}^3}}\right) \tilde{\nu}_t}{(\kappa y)^2}, C_s \Omega\right)$$

$$r = \min \left(\frac{\tilde{\nu}_t}{\tilde{S}(\kappa y)^2}, 10\right), D_{\tilde{\nu}} = \frac{\tilde{\nu}_t + \nu}{\sigma_{\nu_t}}, \sigma_{\nu_t} = 0.666666, \kappa = 0.41, C_{b1} = 0.1355$$

$$C_{b2} = 0.622, C_{w1} = \frac{C_{b1}}{\kappa} + \frac{1 + C_{b2}}{\sigma_{\nu_t}}, C_{w2} = 0.3, C_{w3} = 2, C_{v1} = 7.1, C_s = 0.3$$

kOmega

$$\frac{\partial \alpha \rho k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \rho \mathbf{U} k) - \nabla \cdot (\alpha \rho D_k \nabla k) = \alpha \rho G - \frac{2}{3} \alpha \rho \nabla \cdot \mathbf{U} k - C_\mu \alpha \rho \omega k + S_k$$

$$\frac{\partial \alpha \rho \omega}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \rho \mathbf{U} \omega) - \nabla \cdot (\alpha \rho D_\omega \nabla \omega) = \gamma \alpha \rho G \frac{\omega}{k} - \frac{2}{3} \gamma \alpha \rho \nabla \cdot \mathbf{U} \omega - \beta \alpha \rho \omega^2 + S_\omega$$

$$G = \nu_t \left(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{U}) \mathbf{I} \right) : \nabla \mathbf{U}, \nu_t = \frac{k}{\omega}, C_\mu = 0.09, \beta = 0.072, \alpha_k = 0.5, \alpha_\omega = 0.5, \gamma = 0.52$$

$$D_k = \alpha_k \nu_t + \nu, D_\varepsilon = \alpha_\omega \nu_t + \nu$$

kOmegaSSTSAS 在 $k-\omega$ SST 模型上添加 ω 方程源项:

$$S_{\omega} = \alpha \rho \omega \min \left(\max \left(\zeta_{2} \kappa S_{2} \left(\frac{L}{L_{vk}} \right)^{2} - \frac{2C}{\sigma_{\phi}} k \max \left(\frac{|\nabla \omega|^{2}}{\omega}, \frac{|\nabla k|^{2}}{k} \right), 0 \right), \frac{\omega}{0.1 \Delta t} \right)$$

$$L_{vk} = \max \left(\frac{\kappa \sqrt{S_{2}}}{|\nabla \cdot (\nabla \mathbf{U})|}, C_{s} \sqrt{\frac{\kappa \zeta_{2}}{\beta/\beta^{*} - \gamma}} \Delta \right), L = \frac{\sqrt{k}}{\beta^{*0.25} \omega}$$

$$C_{s} = 0.11, \kappa = 0.41, \zeta_{2} = 3.51, \sigma_{\phi} = \frac{2}{3}, C = 2, \Delta = \Delta x \Delta y \Delta z^{1/3}$$

v2f

$$\begin{split} \frac{\partial \alpha \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \rho \mathbf{U} \varepsilon) - \nabla \cdot (\alpha \rho D_{\varepsilon} \nabla \varepsilon) &= C_{\varepsilon,1} \alpha \rho \frac{G}{Ts} - \left(\left(\frac{2}{3} C_{\varepsilon,1} + C_{\varepsilon,3} \right) \alpha \rho \nabla \cdot \mathbf{U} \varepsilon \right) - C_{\varepsilon,2} \alpha \frac{\rho}{Ts} \varepsilon + S_{\varepsilon} \\ &\frac{\partial \alpha \rho k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \rho \mathbf{U} k) - \nabla \cdot (\alpha \rho D_{k} \nabla k) = \alpha \rho G - \frac{2}{3} \alpha \rho \nabla \cdot \mathbf{U} k - \alpha \rho \frac{\epsilon}{k} k + S_{k} \\ &- \nabla \cdot (\nabla f) = -\frac{1}{L_{2}} f - \frac{1}{L_{2} k} \left(v_{f,\alpha} - C_{2} G \right) \\ &\frac{\partial \alpha \rho v_{2}}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \rho \mathbf{U} v_{2}) - \nabla \cdot (\alpha \rho D_{k} \nabla v_{2}) = \alpha \rho \min \left(kf, C_{2} G - v_{2,\alpha} \right) - N\alpha \rho \frac{\varepsilon}{k} v_{2} \\ &C_{\varepsilon,1} = 1.4 \left(1 + 0.05 \min \left(\sqrt{\frac{k}{v_{2}}}, 100 \right) \right), L_{2} = L_{s}^{2}, Ts = \max \left(\frac{k}{\varepsilon}, 6 \sqrt{\frac{\nu}{\varepsilon}} \right), L_{s} = C_{l} \max \left(\frac{k^{1.5}}{\varepsilon}, C_{\eta} \frac{\nu^{3}}{\varepsilon} \right) \right) \\ &S_{2} = 2 \left| \frac{\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^{T}}{2} - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \mathbf{U}) \mathbf{I} \right|^{2}, v_{2,\alpha} = \frac{1}{Ts} \left((C_{1} - N) v_{2} - \frac{2}{3} k (C_{1} - 1) \right), \nu_{t} = \min \left(\frac{C_{\mu,k\varepsilon} k^{2}}{\varepsilon}, C_{\mu} v_{2} Ts \right) \right. \\ &D_{k} = \frac{\nu_{t}}{\sigma_{k}} + \nu, D_{\varepsilon} = \frac{\nu_{t}}{\sigma_{\varepsilon}} + \nu, N = 6, C_{\mu} = 0.22, C_{\mu,k\varepsilon} = 0.09, C_{1} = 1.4, C_{2} = 0.3, C_{l} = 0.23 \\ &C_{\eta} = 70, C_{\varepsilon,2} = 1.9, C_{\varepsilon,3} = -0.33, \sigma_{k} = 1, \sigma_{\varepsilon} = 1.3 \end{split}$$

$LamBremhorstKE^{14}$

$$\begin{split} \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}\varepsilon) - \nabla \cdot (D_{\varepsilon}\nabla\varepsilon) &= C_{\varepsilon_{1}} \left(1 + \left(\frac{0.05}{f_{\mu}}\right)^{3}\right) G \frac{\varepsilon}{k} - C_{\varepsilon_{2}} \left(1 - \exp\left(-R_{t}^{2}\right)\right) \frac{\varepsilon}{k}\varepsilon \\ \frac{\partial k}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}k) - \nabla \cdot (D_{k}\nabla k) &= G - \frac{\epsilon}{k}k \\ G &= \nu_{t} \left(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^{T}\right) : \nabla \mathbf{U}, \nu_{t} = C_{\mu}f_{\mu}\frac{k^{2}}{\varepsilon}, R_{t} = \frac{k^{2}}{\nu\varepsilon}, f_{\mu} = \left(1 - \exp\left(-0.0165\frac{\sqrt{k}y}{\nu}\right)\right)^{2} \left(1 + \frac{20.5}{R_{t}}\right) \\ C_{\mu} &= 0.09, C_{\varepsilon_{1}} = 1.44, C_{\varepsilon_{2}} = 1.92, \sigma_{\varepsilon} = 1.3, D_{k} = \nu_{t} + \nu, D_{\varepsilon} = \frac{\nu_{t}}{\sigma_{\varepsilon}} + \nu \end{split}$$

ShihQuadraticKE

$$\begin{split} \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}\varepsilon) - \nabla \cdot (D_{\varepsilon}\nabla\varepsilon) &= C_{\varepsilon,1}G\frac{\varepsilon}{k} - C_{\varepsilon,2}\frac{\varepsilon}{k}\varepsilon \\ \frac{\partial k}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}k) - \nabla \cdot (D_k\nabla k) &= G - \frac{\varepsilon}{k}k \end{split}$$

 $^{^{14}} src/Turbulence Models/incompressible/turbulent Transport Models/RAS$

$$G = \nu_t \left(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T - \tau_n \right) : \nabla \mathbf{U}, \mathbf{S} = \frac{\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T}{2}, \mathbf{W} = \frac{\nabla \mathbf{U} - \nabla \mathbf{U}^T}{2}, \bar{s} = \sqrt{2} \frac{k}{\varepsilon} |\mathbf{S}|$$

$$\tau_n = \frac{k^3}{\varepsilon (C_\beta + \bar{s}^2)} \left(C_{\beta_1} \left(\mathbf{S} \cdot \mathbf{S} - \frac{1}{3} \text{tr}(\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}) \mathbf{I} \right) + C_{\beta_2} \left(\mathbf{S} \cdot \mathbf{W} + (\mathbf{S} \cdot \mathbf{W})^T \right) + C_{\beta_3} \left(\frac{\mathbf{W} \cdot \mathbf{W} + (\mathbf{W} \cdot \mathbf{W})^T}{2} - \frac{1}{3} \text{tr}(\mathbf{W} \cdot \mathbf{W}) \mathbf{I} \right) \right)$$

$$\bar{w} = \sqrt{2} \frac{k}{\varepsilon} |\mathbf{W}|, C_\mu = \frac{2/3}{C_{\mu_1} + \bar{s} + C_{\mu_2} \bar{w}}, \nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}, C_{\varepsilon, 1} = 1.44, C_{\varepsilon, 1} = 1.92, \sigma_k = 1$$

$$\sigma_\varepsilon = 1.3, C_{\mu_1} = 1.25, C_{\mu_2} = 0.9, C_\beta = 1000, C_{\beta_1} = 3, C_{\beta_2} = 15, C_{\beta_3} = -19, D_k = \frac{\nu_t}{\sigma_k} + \nu, D_\varepsilon = \frac{\nu_t}{\sigma_\varepsilon} + \nu$$
Zeta

qZeta

$$\begin{split} \frac{\partial \zeta}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}\zeta) - \nabla \cdot (D_{\zeta}\nabla\zeta) &= (2C_1 - 1)G\frac{\zeta}{q} - \left((2C_2f_2 - 1)\frac{\zeta}{q}\right)\zeta + E \\ \frac{\partial q}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}q) - \nabla \cdot (D_k\nabla q) &= G - \frac{\zeta}{q}q \\ G &= \frac{\nu_t}{2q}2 \left|\frac{\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T}{2}\right|^2, E = \frac{\nu\nu_t}{q} \left|\nabla \nabla (\mathbf{U})\right|^2, k = q^2, \varepsilon = 2q\zeta, \nu_t = C_{\mu}f_{\mu}\frac{k^2}{\varepsilon}, f_2 = 1 - 0.3 \exp(-R_t^2) \\ R_t &= \frac{qk}{2\nu\zeta}, f_{\mu} = \exp\left(\frac{-6}{\left(1 + \frac{R_t}{50}\right)^2}\right)\left(1 + 3\exp\left(\frac{-R_t}{10}\right)\right) \\ C_{\mu} &= 0.09, C_1 = 1.44, C_2 = 1.92, \sigma_{\zeta} = 1.3, D_q = \nu_t + \nu, D_{\zeta} = \frac{\nu_t}{\sigma_{\zeta}} + \nu \end{split}$$

 ${\bf Lien Les chziner}$

$$\begin{split} \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}\varepsilon) - \nabla \cdot (D_{\varepsilon}\nabla\varepsilon) &= C_{\varepsilon,1}G\frac{\varepsilon}{k} - C_{\varepsilon,2}f_{2}\frac{\varepsilon}{k}\varepsilon + E \\ \frac{\partial k}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}k) - \nabla \cdot (D_{k}\nabla k) &= G - \frac{\varepsilon}{k}k \\ G &= \nu_{t} \left(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^{T}\right) : \nabla \mathbf{U}, R_{t} = \frac{k^{2}}{\nu\varepsilon}, \nu_{t} = C_{\mu}f_{\mu}\frac{k^{2}}{\varepsilon}, f_{\mu} = \frac{1 + e^{-A_{\mu}y^{*}}}{1 - e^{-A_{\varepsilon}y^{*}}}, f_{2} = 1 - 0.3e^{-R_{t}^{2}} \\ y^{*} &= \frac{k^{2}y}{\nu}, le = \kappa y \left(1 - e^{-A_{\varepsilon}y^{*}}\right), E = C_{\varepsilon,2}C_{\mu}^{0.75} \left(\frac{f_{2}\sqrt{k\varepsilon}}{le}\right) e^{-A_{E}y^{*}}, D_{\varepsilon} = \frac{\nu_{t}}{\sigma_{\varepsilon}} + \nu \end{split}$$

 $C_{\varepsilon,1} = 1.44, C_{\varepsilon,2} = 1.92, \sigma_k = 1, \sigma_{\varepsilon} = 1.3, C_{\mu} = 0.09, \kappa = 0.41, A_{\nu} = 0.016, A_{\varepsilon} = 0.263, A_E = 0.222, D_k = \frac{\nu_t}{\sigma_k} + \nu_k$

LienCubicKE

$$\begin{split} \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}\varepsilon) - \nabla \cdot (D_{\varepsilon}\nabla\varepsilon) &= C_{\varepsilon,1}G\frac{\varepsilon}{k} - C_{\varepsilon,2}f_{2}\frac{\varepsilon}{k} + E\varepsilon \\ \frac{\partial k}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}k) - \nabla \cdot (D_{k}\nabla k) &= G - \frac{\varepsilon}{k}k \\ G &= \nu_{t} \left(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^{T} - \tau_{n}\right) : \nabla \mathbf{U}, y^{*} = \frac{k^{2}y}{\nu}, \mathbf{S} = \frac{\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^{T}}{2}, \mathbf{W} = \frac{\nabla \mathbf{U} - \nabla \mathbf{U}^{T}}{2} \\ \bar{s} &= \sqrt{2}\frac{k}{\varepsilon} |\mathbf{S}|, \bar{w} = \sqrt{2}\frac{k}{\varepsilon} |\mathbf{W}|, C_{\mu} = \frac{2/3}{C_{\mu_{1}} + \bar{s} + C_{\mu_{2}}\bar{w}}, \nu_{t} = C_{\mu}f_{\mu}\frac{k^{2}}{\varepsilon} \end{split}$$

$$\begin{split} \tau_n &= f_\mu k \frac{k^2/\varepsilon^2}{C_\beta + \bar{s}^3} \\ & \left(C_{\beta_1} \left(\mathbf{S} \cdot \mathbf{S} - \frac{1}{3} \mathrm{tr}(\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}) \mathbf{I} \right) + C_{\beta_2} \left(\mathbf{S} \cdot \mathbf{W} + (\mathbf{S} \cdot \mathbf{W})^T \right) + C_{\beta_3} \left(\frac{\mathbf{W} \cdot \mathbf{W} + (\mathbf{W} \cdot \mathbf{W})^T}{2} - \frac{1}{3} \mathrm{tr}(\mathbf{W} \cdot \mathbf{W}) \mathbf{I} \right) \right) \\ & - f_\mu k \left(\frac{C_\mu k}{\varepsilon} \right)^3 \left(C_{\gamma,1} |\mathbf{S}|^2 - C_{\gamma,2} |\mathbf{W}|^2 \right) \mathbf{S} - f_\mu k \left(\frac{C_\mu k}{\varepsilon} \right)^3 C_{\gamma,4} \left((\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}) \cdot \mathbf{W} + ((\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}) \cdot \mathbf{W})^T \right) \\ f_\mu &= \frac{1 - e^{-A_\mu y^*}}{1 + \frac{2j\kappa}{C_\mu^{0,75} y^*}}, f_2 = 1 - 0.3 e^{-R_t^2}, R_t = \frac{k^2}{\nu \varepsilon}, E = C_{\varepsilon,2} C_\mu^{0.75} \left(\frac{f_2 \sqrt{k} \varepsilon}{le} \right) e^{-A_E y^*}, le = \frac{\kappa y}{1 + \frac{2\kappa}{C_\mu^{0.75} y^*}} \end{split}$$

$$C_{\varepsilon,1} = 1.44, C_{\varepsilon,1} = 1.92, \sigma_k = 1, \sigma_{\varepsilon} = 1.3, C_{\mu_1} = 1.25, C_{\mu_2} = 0.9, C_{\beta} = 1000, C_{\beta_1} = 3, C_{\beta_2} = 15, C_{\beta_3} = -19$$

$$C_{\gamma,1} = 16, C_{\gamma,2} = 16, C_{\gamma,4} = -80, C_{\mu} = 0.09, \kappa = 0.41, D_k = \frac{\nu_t}{\sigma_k} + \nu, D_{\varepsilon} = \frac{\nu_t}{\sigma_{\varepsilon}} + \nu, A_{\nu} = 0.0198, A_E = 0.00375$$

BuoyantKE¹⁵

$$\begin{split} \frac{\partial \alpha \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \rho \mathbf{U} \varepsilon) - \nabla \cdot (\alpha \rho D_{\varepsilon} \nabla \varepsilon) &= C_{1} \alpha \rho G \frac{\varepsilon}{k} - \left(\left(\frac{2}{3} C_{1} - C_{3,RDT} \right) \alpha \rho \varepsilon \nabla \cdot \mathbf{U} \right) - C_{2} \alpha \rho \frac{\varepsilon}{k} \varepsilon + S_{\varepsilon} \\ \frac{\partial \alpha \rho k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \rho \mathbf{U} k) - \nabla \cdot (\alpha \rho D_{k} \nabla k) &= \alpha \rho G - \frac{2}{3} \alpha \rho \nabla \cdot \mathbf{U} k - \alpha \rho \frac{\epsilon}{k} k + S_{k} \\ G &= \nu_{t} \left(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^{T} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{U}) \mathbf{I} \right) : \nabla \mathbf{U}, \nu_{t} = C_{\mu} \frac{k^{2}}{\epsilon}, C_{\mu} = 0.09, C_{1} = 1.44, C_{2} = 1.92, C_{3,RDT} = 0 \\ S_{k} &= -G_{c} k, S_{\varepsilon} = -\frac{C_{1} \tanh(|v|/u)}{G_{c}} \varepsilon, v = \frac{\mathbf{g}}{|\mathbf{g}|} \cdot \mathbf{U}, u = \left| \mathbf{U} - \frac{\mathbf{g}}{|\mathbf{g}|} v \right|, G_{c} = C_{g} C_{\mu} \alpha k (\mathbf{g} \cdot \nabla \rho) / \varepsilon \\ \sigma_{k} &= 1, \sigma_{\varepsilon} = 1.3, D_{k} = \frac{\nu_{t}}{\sigma_{k}} + \nu, D_{\varepsilon} = \frac{\nu_{t}}{\sigma_{\varepsilon}} + \nu, C_{g} = 1 \end{split}$$

$kOmegaSST^{16}$

$$\frac{\partial \alpha \rho k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \rho \mathbf{U} k) - \nabla \cdot (\alpha \rho D_k \nabla k) = \alpha \rho P_k(G) - \frac{2}{3} \alpha \rho k (\nabla \cdot \mathbf{U}) - \alpha \rho \beta^* \omega k + S_k.$$

$$\begin{split} \frac{\partial \alpha \rho \omega}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \rho \mathbf{U} \omega) - \nabla \cdot (\alpha \rho D_{\omega} \nabla \omega) \\ &= \alpha \rho \gamma \min \left(\frac{G}{\nu_t}, \frac{c_1}{a_1} \beta^* \omega \max \left(a_1 \omega, b_1 F_2 \sqrt{S_2} \right) \right) - \frac{2}{3} \alpha \rho \gamma \left(\nabla \cdot \mathbf{U} \right) \omega - \alpha \rho \beta \omega^2 - \alpha \rho \left(F_1 - 1 \right) \frac{C_{D,k\omega}}{\omega} \omega + S_{\omega}, \\ D_k &= B(F_1, \alpha_{k1}, \alpha_{k2}) \nu_t + \nu, C_{D,k\omega} = \frac{2\alpha_{\omega,2} (\nabla k \cdot \nabla \omega)}{\omega}, G = \nu_t \left(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{U}) \mathbf{I} \right) : \nabla \mathbf{U} \\ S_2 &= 2 \left| \frac{\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T}{2} \right|^2, P_k(G) = \min \left(G, C_1 \beta^* k \omega \right), \nu_t = \frac{a_1 k}{\max \left(a_1 \omega, b_1 F_2 \sqrt{S_2} \right)} \\ F_2 &= \tanh \left(\left(\min \left(\min \left(\max \left(\frac{2k}{\beta^* \omega y}, 500 \frac{\nu}{\omega y^2} \right), \frac{4\alpha_{\omega,2} k}{C_{D,k\omega} y^2} \right), 100 \right) \right)^2 \right) \\ F_1 &= \tanh \left(\left(\min \left(\max \left(\frac{k}{\beta^* \omega y}, 500 \frac{\nu}{\omega y^2} \right), 10 \right) \right)^4 \right) \\ D_{\omega} &= B(F_1, \alpha_{\omega 1}, \alpha_{\omega 2}) \nu_t + \nu, \varepsilon = \beta^* k \omega, \beta = B(F_1, \beta_1, \beta_2), \gamma = B(F_1, \gamma_1, \gamma_2), B(a, b, c) = a(b - c) + c \\ \alpha_{k,1} &= 0.85, \alpha_{k,2} = 1, \alpha_{\omega,1} = 0.5, \alpha_{\omega,1} = 0.856, \gamma_1 = \frac{5}{9} \\ \gamma_2 &= 0.44, \beta_1 = 0.075, \beta_2 = 0.0828, \beta^* = 0.09, a_1 = 0.31, b_1 = 1, c_1 = 10 \end{split}$$

LES 湍流模型¹⁷

Smagorinsky¹⁸

$$\nu_t = C_k \Delta \sqrt{k_{sgs}}, \mathbf{D} = \frac{\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T}{2}, \varepsilon = \frac{C_e k_{sgs} \sqrt{k_{sgs}}}{\Delta}, C_k = 0.094, C_e = 1.048$$
$$k_{sgs} = \left(\frac{-b + \sqrt{b^2 + 4ac}}{2a}\right)^2, a = \frac{C_e}{\Delta}, b = \frac{2}{3}(\mathbf{D}_{xx} + \mathbf{D}_{yy} + \mathbf{D}_{zz}), c = 2C_k \Delta ((\mathbf{D}) : \mathbf{D})$$

 $^{^{15} {\}rm src/Turbulence Models/compressible/RAS}$

 $^{^{16} {\}rm src/Turbulence Models/turbulence Models/Base}$

 $^{^{17} {\}rm src/Turbulence Models/turbulence Models/LES}$

^{18 △} 表示截止尺度模型

WALE

$$\nu_t = C_k \Delta \sqrt{k_{sgs}}, \mathbf{S}_d = \frac{\nabla \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U})^T}{2} - \frac{1}{3} \text{tr}(\nabla \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U}) \mathbf{I}, C_e = 1.048$$

$$k_{sgs} = \left(C_w \frac{\Delta}{C_k}\right)^2 \frac{|\mathbf{S}_d|^2}{(|\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T|^{5/2} + |\mathbf{S}_d|^{5/4})^2}, \varepsilon = \frac{C_e k_{sgs} \sqrt{k_{sgs}}}{\Delta}, C_k = 0.094, C_w = 0.325$$

SpalartAllmarasDES

$$\begin{split} \frac{\partial \alpha \rho \tilde{\nu}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\alpha \rho \mathbf{U} \tilde{\nu} \right) - \nabla \cdot \left(\alpha \rho D_{\tilde{\nu}} \nabla \tilde{\nu} \right) - \frac{C_{b2}}{\sigma_{\nu_{t}}} \alpha \rho |\nabla \tilde{\nu}|^{2} &= C_{b1} \alpha \rho \tilde{S} \tilde{\nu} - \frac{C_{w1} \alpha \rho f_{w}(\tilde{S}, \tilde{d}) \tilde{\nu}}{\tilde{d}^{2}} \tilde{\nu} \\ f_{w}(\tilde{S}, \tilde{d}) &= g \left(\frac{1 + C_{w3}^{6}}{g^{6} + C_{w3}^{6}} \right)^{\frac{1}{6}}, g = r + C_{w2} \left(r^{6} - r \right), r = \min \left(\frac{\tilde{\nu}}{\tilde{S} \kappa^{2} \tilde{d}^{2}}, 10 \right), \chi = \frac{\tilde{\nu}}{\nu}, f_{v1} = \frac{\chi^{3}}{\chi^{3} + C_{v1}^{3}} \\ f_{v2} &= 1 - \frac{\chi}{1 + \chi f_{v1}}, S = \sqrt{2} \left| \frac{\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^{T}}{2} \right|, \Omega = \sqrt{2} \left| \frac{\nabla \mathbf{U} - \nabla \mathbf{U}^{T}}{2} \right|, \nu_{t} = \tilde{\nu} f_{v1} \\ \tilde{S} &= \max \left(\frac{\Omega + f_{v2} \tilde{\nu}}{\kappa^{2} \tilde{d}^{2}}, C_{s} \Omega \right), \tilde{d} = \min \left(C_{\text{DES}} \Delta, y C_{\text{DES}} \Delta \right), k_{sgs} = \left(\frac{\nu_{t}}{C_{k} \tilde{d}} \right)^{2}, \sigma_{\nu_{t}} = 0.66666, \kappa = 0.41, C_{e} = 1.048 \\ C_{b1} &= 0.1355, C_{b2} = 0.622, C_{w1} = \frac{C_{b1}}{\kappa^{2}} + \frac{1 + C_{b2}}{\sigma_{\nu_{t}}}, C_{w2} = 0.3, C_{w3} = 2, C_{v1} = 7.1, C_{s} = 0.3, C_{\text{DES}} = 0.65, C_{k} = 0.07 \end{split}$$

SpalartAllmarasDDES:在 SpalartAllmarasDES 模型的基础上,更改

$$r = \min\left(\frac{\nu + \nu_t}{|\mathbf{S}|\kappa^2 \tilde{d}^2}, 10\right), \tilde{d} = y - \left(1 - \tanh\left((8r)^3\right)\right)\left(y - C_{\text{DES}}\Delta\right)$$

kEqn

$$\frac{\partial \alpha \rho k_{sgs}}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \rho \mathbf{U} k_{sgs}) - \nabla \cdot (\alpha \rho D_k \nabla k_{sgs}) = \alpha \rho G - \frac{2}{3} \alpha \rho \nabla \cdot \mathbf{U} k_{sgs} - C_e \alpha \rho \frac{k_{sgs}}{\Delta} k_{sgs} + S_k$$

$$G = \nu_t \left(\left(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{U}) \mathbf{I} \right) : \nabla \mathbf{U} \right), \nu_t = C_k \sqrt{k_{sgs}} \Delta, \varepsilon = C_e k_{sgs} \frac{\sqrt{k_{sgs}}}{\Delta}, C_e = 1.048, C_k = 0.094$$

dynamicLagrangian¹⁹

$$\frac{\partial \alpha \rho \jmath_{lm}}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \rho \mathbf{U} \jmath_{lm}) = \frac{1}{T} (L_m - \jmath_{lm})$$

$$\frac{\partial \alpha \rho \jmath_{mm}}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \rho \mathbf{U} \jmath_{lm}) = \frac{1}{T} (M_m - \jmath_{lm})$$

$$\frac{1}{T} = \alpha \rho \frac{1}{\theta \Delta} (\jmath_{lm} \jmath_{mm})^{1/8}, \mathbf{S} = \frac{\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T}{2} - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \mathbf{U}) \mathbf{I}, \mathbf{S}_f = \frac{\nabla f i(\mathbf{U}) + (\nabla f i(\mathbf{U}))^T}{2} - \frac{1}{3} (\operatorname{tr}(f i(\mathbf{U}))) \mathbf{I}$$

$$\mathbf{L} = f i(\mathbf{U}\mathbf{U}) - \frac{1}{3} \operatorname{tr}(f i(\mathbf{U}\mathbf{U})) \mathbf{I} - f i(\mathbf{U})^2, \mathbf{M} = 2\Delta^2 (f i(|\mathbf{S}|\mathbf{S}) - 4|\mathbf{S}_f|\mathbf{S}_f), L = \mathbf{L} : \mathbf{M}$$

$$\nu_t = \frac{\jmath_{lm}}{\jmath_{mm}} \Delta^2 \left| \frac{\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T}{2} - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \mathbf{U}) \mathbf{I} \right|, \theta = 1.5$$

$$k_{sgs} = \left(\frac{2\jmath_{lm}}{\jmath_{mm}} \right)^{2/3} C_e^{-2/3} \Delta^2 \left| \frac{\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T}{2} - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \mathbf{U}) \mathbf{I} \right|^2$$

dynamicKEqn

$$\begin{split} \frac{\partial \alpha \rho k_{sgs}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\alpha \rho \mathbf{U} k_{sgs}\right) - \nabla \cdot \left(\alpha \rho D_k \nabla k_{sgs}\right) &= \alpha \rho G - \frac{2}{3} \alpha \rho \nabla \cdot \mathbf{U} k_{sgs} - C_e \alpha \rho \frac{k_{sgs}}{\Delta} k_{sgs} + S_k \\ \mathbf{D} &= \frac{\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T}{2} - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \mathbf{U}) \mathbf{I}, G = 2\nu_t \nabla \mathbf{U} : \mathbf{D}, \nu_t = C_k \sqrt{k_{sgs}} \Delta, C_e' = \frac{\left(\nu + \nu_t\right) \left(fi(|\mathbf{D}|^2) - |fi(\mathbf{D})|^2\right)}{fi\left(\frac{KK^{1.5}}{2\Delta}\right)} \\ \mathbf{L} \mathbf{L} &= fi\left(fi(\mathbf{U}\mathbf{U}) - \frac{1}{3} \mathrm{tr}(fi(\mathbf{U}\mathbf{U})) \mathbf{I} - fi(\mathbf{U})^2\right), \mathbf{M} \mathbf{M} = fi\left(-2\Delta \sqrt{KK} fi(\mathbf{D})\right), C_k' = \frac{fi\left(0.5\mathbf{LL} : \mathbf{MM}\right)}{fi(|\mathbf{MM}|^2)} \\ KK &= \frac{1}{2} \left(fi(|\mathbf{U}|^2) - |fi(\mathbf{U})|^2\right), C_e = \frac{1}{2} (|C_e'| + C_e'), C_k = \frac{1}{2} (|C_k'| + C_k'), D_k = \nu_t + \nu \end{split}$$

¹⁹fi()表示滤波函数模型

曳力模型(欧拉方法)²⁰

SchillerNaumann

$$\begin{aligned} \text{CdRe} &= \begin{cases} 24 \left(1 + 0.15 \text{Re}^{0.687} \right), & \text{Re} < 1000 \\ & 0.44 \text{Re}, & \text{Re} \geq 1000 \end{cases} \\ \text{Re} &= \frac{d_{\text{d}} |\mathbf{U}_{\text{d}} - \mathbf{U}_{\text{c}}|}{\nu_{\text{c}}} \end{aligned}$$

SyamlalOBrien

$$CdRe = \alpha_{c} \left(0.63\sqrt{Re} + 4.8\sqrt{V_{r}} \right) / V_{r}^{2}$$

$$V_{r} = 0.5 \left(A - 0.06Re + \sqrt{(0.06Re)^{2} + 0.12Re(2B - A) + A^{2}} \right)$$

$$A = (\alpha_{c})^{4.14}, B = \begin{cases} 0.8\alpha_{c}^{1.28}, & \alpha_{c} < 0.85\\ \alpha_{c}^{2.65}, & \alpha_{c} \ge 0.85 \end{cases}$$

Tenneti

$$\begin{aligned} \mathrm{CdRe} &= \mathrm{CdRe}_{iso} + 24\alpha_{\mathrm{c}}^{2}(F0 + F1) \\ F0 &= 5.81\frac{\alpha_{\mathrm{d}}}{\alpha_{r}c^{3}} + 0.48\frac{\alpha_{\mathrm{d}}^{1/3}}{\alpha_{\mathrm{c}}^{4}}, F1 = \alpha_{\mathrm{d}}^{3}\mathrm{Re}_{s}\left(0.95 + 0.61\frac{\alpha_{\mathrm{d}}^{3}}{\alpha_{\mathrm{c}}^{2}}\right) \\ \mathrm{CdRe}_{iso} &= \begin{cases} 24\left(1 + 0.15\mathrm{Re}_{s}^{0.687}\right), & \mathrm{Re}_{s} < 1000 \\ 0.44\mathrm{Re}_{s}, & \mathrm{Re}_{s} \geq 1000 \end{cases} \\ \mathrm{Re}_{s} &= \alpha_{\mathrm{c}}\mathrm{Re} \end{aligned}$$

TomiyamaKataokaZunSakaguchi

$$\mathrm{CdRe} = \max\left(\frac{24\left(1+0.15\mathrm{Re}^{0.687}\right)}{\mathrm{Re}}, \frac{8}{3}\frac{Eo}{3Eo+4}\right)\mathrm{Re}$$

$$Eo = \frac{|\rho_\mathrm{d}-\rho_\mathrm{c}||\mathbf{g}|d_\mathrm{d}^2}{\sigma}$$

TomiyamaAnalytic

$$CdRe = \frac{8}{3} \frac{Eo}{16E^{4/3} + Eo\frac{E^{2/3}}{1-E^2}} \frac{1}{F^2}Re$$

$$F = \frac{a\sin(\sqrt{1 - E^2}) - E\sqrt{1 - E^2}}{1 - E^2}$$

TomiyamaCorrelated

CdRe = max
$$\left(A \min \left(1 + 0.15 \text{Re}^{0.687}, 3 \right), \frac{8}{3} \frac{Eo\text{Re}}{3Eo + 4} \right)$$

WenYu

$$CdRe = (1 - \alpha_d)^{-3.65} \begin{cases} (1 - \alpha_d)24 \left(1 + 0.15Re^{0.687}\right), & (1 - \alpha_d)Re < 1000 \\ (1 - \alpha_d)0.44Re, & (1 - \alpha_d)Re \ge 1000 \end{cases}$$

Lain

$$CdRe = \begin{cases} 16Re, & Re < 1.5\\ 14.9Re^{0.22}, & 1.5 \le Re < 80\\ 48\left(1 - \frac{2.21}{Re}\right), & 80 \le Re < 1500\\ 2.51Re, & Re \ge 1500 \end{cases}$$

IshiZuber

$$CdRe = \begin{cases} \min \left(CdRe_{ell}, 2.66667Re(1 - \alpha_d)^2 \right), & CdRe_{ell} \ge CdRe \\ & CdRe, & CdRe_{ell} < CdRe \end{cases}$$

 $^{^{20}} applications/solvers/multiphase/reacting Euler Foam/interfacial Models/drag Models/reacting Euler Foam/interfacial Models/drag Mod$

$$\begin{aligned} \text{CdRe}_{ell} &= 0.66666 E_{\alpha} \text{Re} \sqrt{Eo}, E_{\alpha} = \frac{1 + 17.67 F^{0.8571428}}{18.67 F} \\ F &= \max \left(\frac{\mu_{\text{c}}}{\mu_{m}} \sqrt{1 - \alpha_{\text{d}}}, 0.001 \right), \text{Re}_{m} = \frac{\mu_{\text{c}}}{\mu_{m}} \text{Re} \\ \text{CdRe} &= \begin{cases} 24 \left(1 + 0.15 \text{Re}_{m}^{0.687} \right), & \text{Re}_{m} < 1000 \\ 0.44 \text{Re}_{m}, & \text{Re}_{m} \geq 1000 \end{cases} \\ \mu_{m} &= \mu_{\text{c}} \left(1 - \alpha_{\text{d}}, 0.001 \right)^{-2.5 \frac{\mu_{\text{d}} + 0.4 \mu_{\text{c}}}{\mu_{\text{d}} + \mu_{\text{c}}}} \end{aligned}$$

GidaspowSchillerNaumann

$$\label{eq:cdre} \begin{aligned} CdRe &= \alpha_c (1-\alpha_d)^{-2.65} \left\{ \frac{\frac{24}{1-\alpha_d} \left(1 + 0.15 Re^{0.687}\right), & (1-\alpha_d) Re < 1000 \\ & (1-\alpha_d) 0.44 Re, & (1-\alpha_d) Re \geq 1000 \\ \end{aligned} \right. \end{aligned}$$

GidaspowWenYu

$$\label{eq:cdRe} CdRe = \begin{cases} CdRe_{WenYu} & \alpha_c \geq 0.8 \\ CdRe_{Ergun} & \alpha_c < 0.8 \end{cases}$$

Gibilaro

$$CdRe = \frac{4}{3}\alpha_c \left(\frac{17.3}{1-\alpha_d} + 0.336Re\right) \left(1-\alpha_d\right)^{-2.8}$$

Ergun

$$CdRe = \frac{4}{3} \left(150 \frac{1 - \alpha_c}{\alpha_c} + 1.75 Re \right)$$

Beetstra

$$\begin{aligned} \mathrm{CdRe} &= 24(1-\alpha_{\mathrm{d}})(F0+F1) \\ F0 &= 10\frac{\alpha_{\mathrm{d}}}{(1-\alpha_{\mathrm{d}})^2} + (1-\alpha_{\mathrm{d}})^2 \left(1+1.5\sqrt{\alpha_{\mathrm{d}}}\right) \\ F1 &= 0.413\frac{\mathrm{Re}_s}{24(1-\alpha_{\mathrm{d}})^2} \frac{\frac{1}{1-\alpha_{\mathrm{d}}} + 3\alpha_{\mathrm{d}}(1-\alpha_{\mathrm{d}}) + 8.4\mathrm{Re}_L^{-0.343}}{1+10^{3\alpha_{\mathrm{d}}}\mathrm{Re}_L^{-(1+4\alpha_{\mathrm{d}})/2}} \\ \mathrm{Re}_L &= (1-\alpha_{\mathrm{d}})\mathrm{Re} \end{aligned}$$

热物理模型 - 状态方程21

rhoConst

 $\rho = \rho_{\rm const}$

perfectGas

 $\rho = \frac{p}{RT}$

perfectFluid

 $\rho = \rho_0 + \frac{p}{RT}$

linear

 $\rho = \rho_0 + \psi p$

incompressible Pefect Gas

$$\rho = \frac{p_0}{RT}$$

icoPolynomial

$$\rho = a_0 + a_1 T + a_2 T^2 + a_3 T^3 + a_4 T^4 + a_5 T^5 + a_6 T^6 + a_7 T^7 + a_8 T^8$$

Boussinesq

$$\rho = \rho_0 (1 - \beta (T - T_0))$$

 $^{^{21}} src/thermophysical Models/specie/equation Of State$

Boussinesq

$$\rho = \rho_0 \left(\frac{p+B}{p_0+B} \right)^{1/\gamma}$$

边界条件22

activeBaffleVelocity:可穿透的速度挡板边界条件。是否穿透取决于压力。

$$x = x_{old} + sign(F_{net}) \frac{\Delta t}{\Delta T}$$
 (75)

其中x表示开放程度, x_{old} 表示上一个时间步的开放程度, F_{net} 表示单位面积的压力,其值为 $\sum p_f |\mathbf{S}_f|$, Δt 表示时间步, ΔT 表示用多少时间去决定是否开启或者关闭。

advective: 基于mixed边界条件的出口边界条件。

该边界条件通过求解下述方程获得 ψ 的边界值

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + W \nabla_f \psi = \frac{W'}{l_{inf}} (\psi_{ref} - \psi) \tag{76}$$

其中 W 表示传输速度:

$$W = \frac{\phi_f}{|\mathbf{S}_f|} \tag{77}$$

其中 ϕ_f 表示通量, l_{inf} 表示参考距离, ψ_{inf} 表示参考未知量, $\nabla_f \psi$ 表示面法向梯度,为一个标量。针对亚音速与超音速,方程右侧具有不同的形式。首先定义近似库朗数为

$$\alpha = \frac{\phi_f}{|\mathbf{S}_f|} \frac{\Delta t}{\Delta d} \tag{78}$$

若未指定参考距离(通常为亚音速)的情况,W'=0,采用欧拉时间格式,其离散形式为

$$\frac{\psi^{t+\Delta t} - \psi^t}{\Delta t} + \frac{\phi_f}{|\mathbf{S}_f|} \frac{\psi^{t+\Delta t} - \psi_P}{\Delta d} = 0$$
 (79)

方程的解为

$$\psi^{t+\Delta t} = w\psi' + (1-w)\phi_{\mathcal{P}} \tag{80}$$

$$\psi' = \psi^t \tag{81}$$

$$w = \frac{1}{1+\alpha} \tag{82}$$

 $^{^{22} {\}rm src/finiteVolume/fields/fvPatchFields}$

若指定参考距离(通常为超音速)的情况,W'=W,采用欧拉时间格式,其离散形式为

$$\frac{\psi^{t+\Delta t} - \psi^t}{\Delta t} + \frac{\phi_f}{|\mathbf{S}_f|} \frac{\psi^{t+\Delta t} - \psi_P}{\Delta d} = \frac{1}{l_{inf}} \frac{\phi_f}{|\mathbf{S}_f|} (\psi_{ref} - \psi^{t+\Delta t})$$
(83)

其解为

$$\psi^{t+\Delta t} = \frac{k\psi_{ref} + \psi^t}{1 + \alpha + k} + \frac{\alpha}{1 + \alpha + k}\psi_{P}$$
(84)

写成通用形式即

$$\psi^{t+\Delta t} = w\psi' + (1-w)\phi_{\mathcal{P}} \tag{85}$$

$$\psi' = \frac{\psi^t + k\psi_{ref}}{1+k} \tag{86}$$

$$w = \frac{1+k}{1+\alpha+k} \tag{87}$$

fixedValue: 固定值边界条件。

inletOutlet: 在面通量小于 0 的时候(进口),给定固定值边界条件,在面通量大于 0 的时候(出口),给定零法向梯度边界条件。

$$\psi_f = w\psi_{\text{fixedValue}} + (1 - w)\psi_P$$

其中 w 为权重, 其值取决于面通量。

freestreamPressure:对于压力的逐渐过渡的混合固定值边界条件与零法向梯度边界条件。

$$\psi_f = w\psi_{\text{fixedValue}} + (1 - w)\psi_P$$

其中w为权重,在亚音速的情况下:

$$w = 0.5 + 0.5 \frac{\mathbf{U}_f \cdot \mathbf{n}_f}{|\mathbf{U}_f|}$$

其中 \mathbf{n}_f 表示面单位矢量, \mathbf{U}_f 表示面上的速度。在超音速的情况下:

$$w = 0.5 - 0.5 \frac{\mathbf{U}_f \cdot \mathbf{n}_f}{|\mathbf{U}_f|}$$

权重逐渐过渡,其值位于0,1之间。

freestreamVelocity:对于速度的逐渐过渡的混合固定值边界条件与零法向梯度边界条件。

$$\psi_f = w\psi_{\text{fixedValue}} + (1 - w)\psi_P$$

其中 w 为权重:

$$w = 0.5 - 0.5 \frac{\mathbf{U}_f \cdot \mathbf{n}_f}{|\mathbf{U}_f|}$$

权重逐渐过渡,其值位于0,1之间。

freestream: 在面通量小于 0 的时候(进口),给定固定值边界条件,其值通过freestreamValue指定,在面通量大于 0 的时候(出口),给定零法向梯度边界条件。在压力、速度基于freestreamPressure与freestreamVelocity指定时,其他变量(如湍流变量)可指定为freestream或inletOutlet。

mixed:混合固定参考值/面法向梯度边界条件。

$$\psi_f = w\psi_{\text{refValue}} + (1 - w)\left(\psi_P + \nabla_f \psi \Delta d\right) \tag{88}$$

其中 $\nabla_f \psi$ 表示面法向梯度, $\psi_{refValue}$ 为固定参考值。

补充资料

本笔记是非常简单的 CFD 入门资料。小部分人如果依旧感觉晦涩难懂,在这里只能推荐学习一下下列内容:

• 《高等数学》同济版:【第2章】导数/微分部分: CFD 控制方程即为导数和微分的结合;【第3章第3节】泰勒方程部分: 大量的 CFD 方程基于泰勒方程;【第8章】向量部分: 了解 CFD 中的矢量操作;【第9章第7节】梯度部分: 了解 CFD 中的梯度操作;【第11章第6节】: 有限体积法中的高斯积分以及通量;

同时,参加东岳流体 OpenFOAM Knowledge Share 课程的同学推荐学习下列内容获得更好的授课效果:

• 《C++ Primer Plus》:【第 7-8 章】函数部分: 学习 OpenFOAM 中大量的类使用,需要首先了解函数的概念;【第 10 章】类部分: 务必要详细学习 C++ 中的类;【第 11-12 章】类的高级用法部分: 在 OpenFOAM 中类的使用不仅多,而且还很高级,因此类的高级使用也需要了解;【第 13 章】类继承部分: 在 OpenFOAM 中所有的类均使用了继承用法;

结尾彩蛋:本笔记封面的方程为双曲系统中重要的基本方程之一。其与双曲系统相结合可推导出m个解耦的对流方程。完整的推导如下:

$$q_t + Aq_x = 0$$

$$A = R^{-1}\Lambda R$$

$$w = Rq$$

$$w_t + \Lambda w_x = 0$$