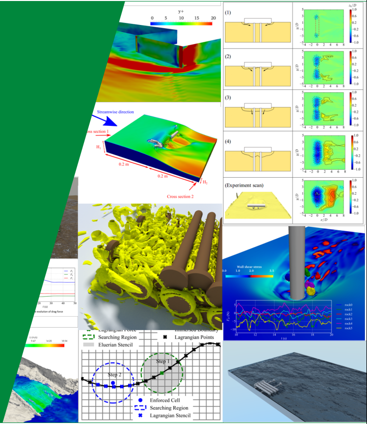
中国农业大学　流体机械与流体工程系

2024年春季《计算流体动力学编程实践》

2.1 复习流体力学方程

徐云成

✉ycxu@cau.edu.cn



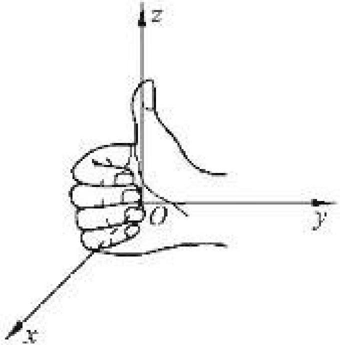
2024 年 3 月 14 日

内容要点

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

张量 Tensor Notation

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



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

图: 右手直角坐标系

基本求导规则

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

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

- 如果对两个函数项的积进行求导，则可以得到以下等式：

$$\frac{\partial fg}{\partial x}=g\frac{\partial f}{\partial x}+f\frac{\partial g}{\partial x} \tag{3}$$

- 如果再乘以一个常数项，那么可以得到：

$$\frac{\partial Cfg}{\partial x}=C\frac{\partial fg}{\partial x} \tag{4}$$

基本求导规则

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

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

- 如果对两个函数项的积进行求导，则可以得到以下等式：

$$\frac{\partial fg}{\partial x} = g\frac{\partial f}{\partial x} + f\frac{\partial g}{\partial x} \tag{3}$$

- 如果再乘以一个常数项，那么可以得到：

$$\frac{\partial Cfg}{\partial x} = C\frac{\partial fg}{\partial x} \tag{4}$$

基本求导规则

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

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

- 如果对两个函数项的积进行求导，则可以得到以下等式：

$$\frac{\partial fg}{\partial x}=g\frac{\partial f}{\partial x}+f\frac{\partial g}{\partial x} \tag{3}$$

- 如果再乘以一个常数项，那么可以得到：

$$\frac{\partial Cfg}{\partial x}=C\frac{\partial fg}{\partial x} \tag{4}$$

- 纳布拉算子 ∇

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

张量 Tensor Notation

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

$$a_ib_i = \sum_{i=1}^{3} = a_1b_1 + a_2b_2 + a_3b_3 \tag{6}$$

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

- 内积（降阶）和外积（升阶） Inner and outer product of vectors and tensors
  - Scalar product: $a\mathbf{b} = ab_i$
  - Inner vector product, producing a scalar: $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_ib_i$
  - Outer vector product, producing a second rank tensor: $\mathbf{a} \bigotimes \mathbf{b} = \mathbf{a}\mathbf{b}^T$
  - Inner product of a vector and a tensor
    - product from the left: $\mathbf{a} \cdot \mathbf{T} = a_iT_{ij}$
    - product from the right: $\mathbf{T} \cdot \mathbf{a} = a_jT_{ij}$

张量 Tensor Notation

- 梯度 Gradient of s

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

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

$$s \text{ is a scalar } \Rightarrow \nabla s \text{ is a vector} \tag{9}$$

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

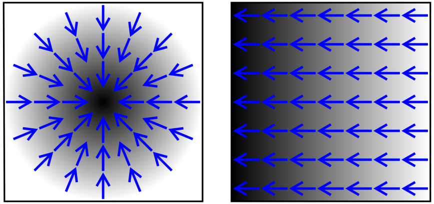


图: 梯度 source from Wikipedia

- 散度 Divergence of **a**

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

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

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

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

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

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

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

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

Laplacian operator is equivalent to "the divergence of the gradient field".

- 时间导数 Temporal derivative: change with time

$$\text{total or material time derivative: } \frac{D\phi}{Dt} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta\phi}{\Delta t} \tag{16}$$

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

u是影响变量ϕ的对流速度

控制方程 Governing Equations

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

质量守恒 Conservation of Mass

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

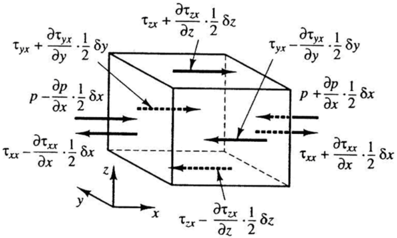


图: 控制体积, Control Volume, CV, C.V.

- Unsteady, 3D:

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

or

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

- if incompressible, $\rho = const$, then

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

质量守恒 Conservation of Mass

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

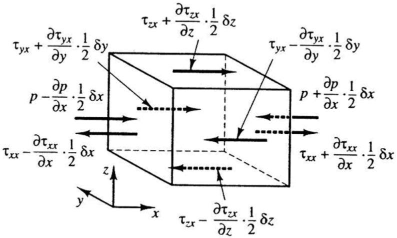


图: 控制体积, Control Volume, CV, C.V.

- Unsteady, 3D:

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

or

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

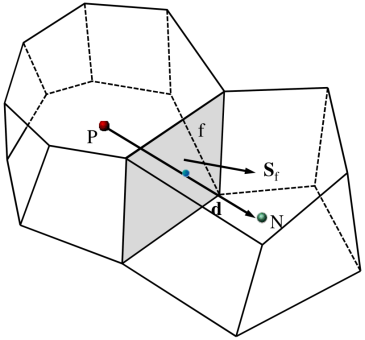
- if incompressible, $\rho = const$, then

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

雷诺传输定理 RTT

RTT stands for Reynolds Transport Theorem

- 雷诺传输定理也称为莱布尼兹-雷诺传输定理
  Reynolds transport theorem is also known as the Leibniz-Reynolds' transport theorem.
- 是以积分符号内取微分闻名的莱布尼兹积分律的三维推广
  It is a 3D generalization of the Leibniz integral rule which is also known as differentiation under the integral sign.
- It can be used to assemble the standard transport equation for a generic property ϕ



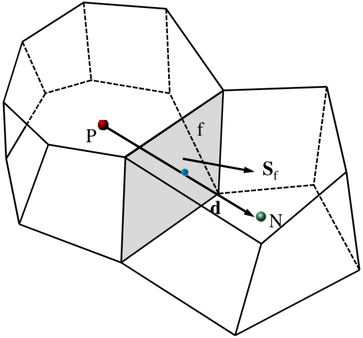
雷诺传输定理 RTT

RTT stands for Reynolds Transport Theorem

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

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

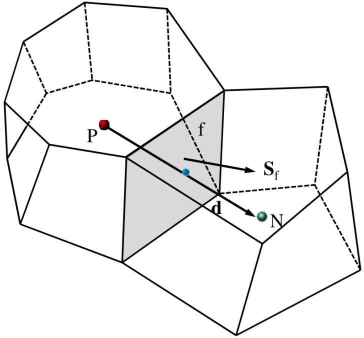
$$\frac{d}{dt}\int_{V} \phi dV = \int_{V} \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{u})\right] dV \quad (22)$$



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

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

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



微分形式控制方程

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

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

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

动量方程 Momentum Equations

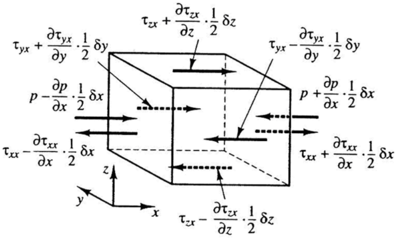


图: 控制体积, Control Volume, CV, C.V.

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

动量方程 Momentum Equations

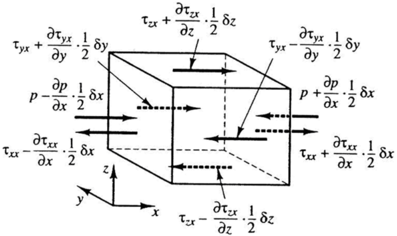


图: 控制体积, Control Volume, CV, C.V.

应用牛顿第二定律，动量方程将变成

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

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

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

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

张量形式动量方程

张量形式：

$$\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{S_M} \tag{28}$$

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

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

拆分成两项

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

$$= -p\mathbb{I} + \mathbb{T} \tag{31}$$

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

偏应力张量

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

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

偏形变张量与偏应力张量呈μ倍关系

黏性系数定义(viscosity):

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

偏应力张量

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

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

偏形变张量与偏应力张量呈μ倍关系

黏性系数定义(viscosity):

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

偏应力张量

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

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

偏形变张量与偏应力张量呈μ倍关系

黏性系数定义(viscosity):

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

Navier-Stokes equations

将牛顿流体关系放入动量方程，我们可以得到可压缩流体N-S方程

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

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

同样可得不可压缩流体N-S方程

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

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

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

Navier-Stokes equations

将牛顿流体关系放入动量方程，我们可以得到可压缩流体N-S方程

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

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

同样可得不可压缩流体N-S方程

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

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

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

Navier-Stokes equations

将牛顿流体关系放入动量方程，我们可以得到可压缩流体N-S方程

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

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

同样可得不可压缩流体N-S方程

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \tag{39}$$

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

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

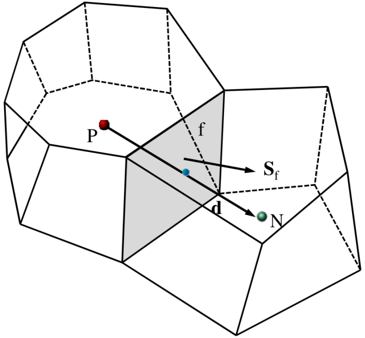
通用输运方程

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

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

面源(volume sources)和体源(surfce sources)

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



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

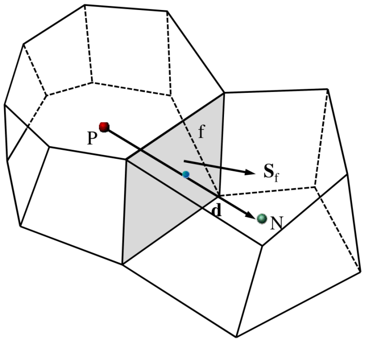
微分：$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla\cdot(\phi\mathbf{u}) = q_V - \nabla\cdot\overrightarrow{q_S} \quad (43)$$

如何模拟扩散输移：

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

$$\overrightarrow{q_S} = -\gamma\nabla\phi \tag{44}$$

γ是扩散系数(diffusivity)



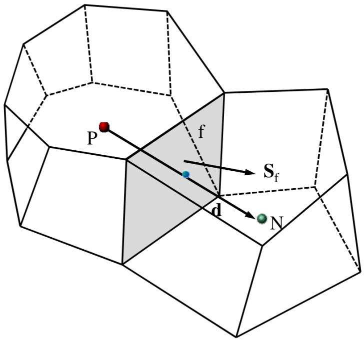
扩散输移 Diffusive Transport

如何模拟扩散输移：

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

$$\vec{q_S} = -\gamma\nabla\phi \tag{44}$$

γ是扩散系数(diffusivity)



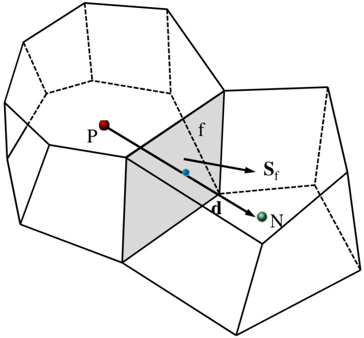
扩散输移 Diffusive Transport

如何模拟扩散输移：

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

$$\overrightarrow{q_S} = -\gamma\nabla\phi \tag{44}$$

γ是扩散系数(diffusivity)



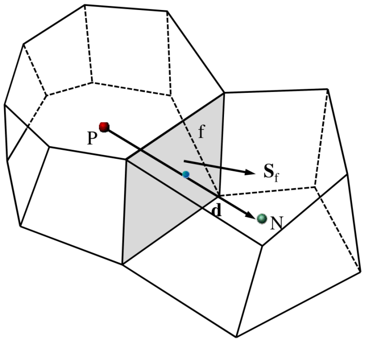
扩散输移 Diffusive Transport

如何模拟扩散输移：

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

$$\overrightarrow{q_S} = -\gamma\nabla\phi \tag{44}$$

γ是扩散系数(diffusivity)



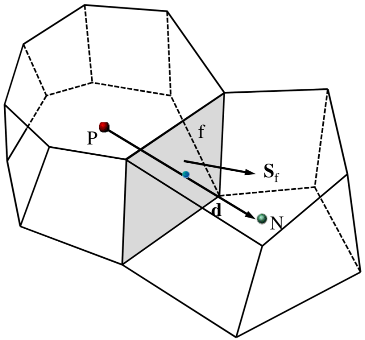
扩散输移 Diffusive Transport

如何模拟扩散输移：

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

$$\overrightarrow{q_S} = -\gamma\nabla\phi \tag{44}$$

γ是扩散系数(diffusivity)



通用输运方程

- $$\underbrace{\frac{\partial \phi}{\partial t}}_{\substack{\text{temopral derivative}\\ \text{时间偏导}}} + \underbrace{\nabla \cdot (\phi \mathbf{u})}_{\substack{\text{convection term}\\ \text{对流项}}} - \underbrace{\nabla \cdot (\lambda \nabla \phi)}_{\substack{\text{diffusion term}\\ \text{扩散项}}} = \underbrace{\mathbf{S}_\phi}_{\substack{\text{source term}\\ \text{源项}}} \tag{45}$$
- 时间偏导是指系统的惯性
- 对流项是指已知速度场形成的对流输运，这项具有双曲（hyperbolic）特性：信息来自周边，定义为对流速度方向
- 扩散项是指梯度输运，具有椭圆（elliptic）特性：空间内任意位置都会同时受到其它所有位置的影响
- 源项是指非输运过程，局部空间内ϕ的生成(production)或者破坏(destruction)

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

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

通用输运方程

- $$\underbrace{\frac{\partial\phi}{\partial t}}_{\substack{\text{temopral derivative}\\ \text{时间偏导}}} + \underbrace{\nabla\cdot(\phi\mathbf{u})}_{\substack{\text{convection term}\\ \text{对流项}}} - \underbrace{\nabla\cdot(\lambda\nabla\phi)}_{\substack{\text{diffusion term}\\ \text{扩散项}}} = \underbrace{\mathbf{S}_\phi}_{\substack{\text{source term}\\ \text{源项}}} \tag{45}$$
- 时间偏导是指系统的惯性
- 对流项是指已知速度场形成的对流输运，这项具有双曲（hyperbolic）特性：信息来自周边，定义为对流速度方向
- 扩散项是指梯度输运，具有椭圆（elliptic）特性：空间内任意位置都会同时受到其它所有位置的影响
- 源项是指非输运过程，局部空间内ϕ的生成(production)或者破坏(destruction)

通用输运方程

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

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

通用输运方程

- $$\underbrace{\frac{\partial \phi}{\partial t}}_{\substack{\text{temopral derivative} \\ \text{时间偏导}}} + \underbrace{\nabla \cdot (\phi \mathbf{u})}_{\substack{\text{convection term} \\ \text{对流项}}} - \underbrace{\nabla \cdot (\lambda \nabla \phi)}_{\substack{\text{diffusion term} \\ \text{扩散项}}} = \underbrace{\mathbf{S}_\phi}_{\substack{\text{source term} \\ \text{源项}}} \tag{45}$$
- 时间偏导是指系统的惯性
- 对流项是指已知速度场形成的对流输运，这项具有双曲（hyperbolic）特性：信息来自周边，定义为对流速度方向
- 扩散项是指梯度输运，具有椭圆（elliptic）特性：空间内任意位置都会同时受到其它所有位置的影响
- 源项是指非输运过程，局部空间内ϕ的生成(production)或者破坏(destruction)

偏微分方程PDE的分类

PDE: partial differential equation

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

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

偏微分方程PDE的分类

- 二阶PDE（2D）：

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

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

偏微分方程PDE的分类

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

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

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

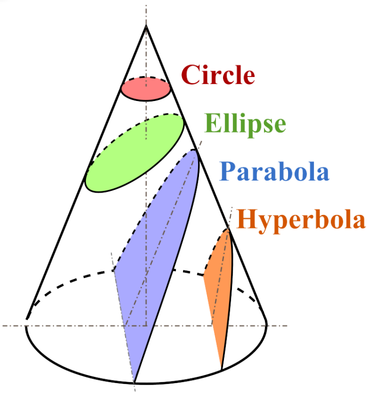


图: source: wikipedia.org

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

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

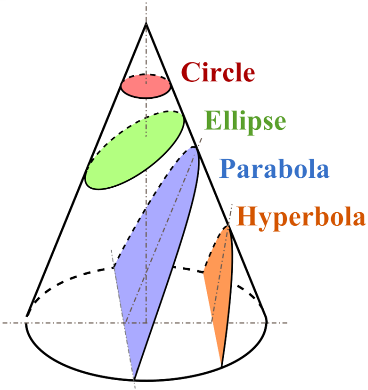


图: source: wikipedia.org

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

偏微分方程PDE的分类

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

$$ax^2 + bxy + y^2 + dx + ey + f = 0 \tag{47}$$

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

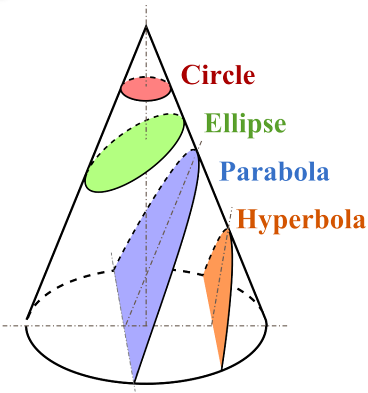


图: source: wikipedia.org

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

$$\nabla^2\phi = 0 \tag{48}$$

同时也是拉普拉斯方程 the Laplace's equation

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

椭圆型方程 Elliptic equations

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

$$\nabla^2\phi=0 \tag{48}$$

同时也是拉普拉斯方程 the Laplace's equation

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

椭圆型方程 Elliptic equations

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

$$\nabla^2\phi = 0 \tag{48}$$

同时也是拉普拉斯方程 the Laplace's equation

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

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

$$\nabla^2\phi = 0 \tag{48}$$

  同时也是拉普拉斯方程 the Laplace's equation
- 求解该问题只需要边界条件，不需要初始条件
- 主要特性：扰动是无限速度全方向展开，因此解是光滑的

椭圆型方程 Elliptic equations

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

$$\nabla^2\phi=0 \tag{48}$$

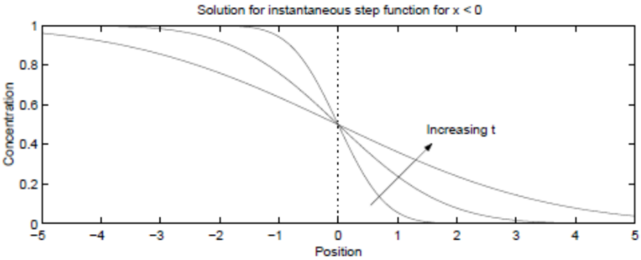
  同时也是拉普拉斯方程 the Laplace's equation
- 求解该问题只需要边界条件，不需要初始条件
- 主要特性：扰动是无限速度全方向展开，因此解是光滑的

抛物型方程 Parabolic equations

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

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nu \nabla^2 \phi \tag{49}$$

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



双曲型方程 Hyperbolic equations

- 忽略耗散（扩散）的非稳态问题
- 例：浅水方程、波动方程

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = c^2 \nabla^2 \phi \tag{50}$$

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

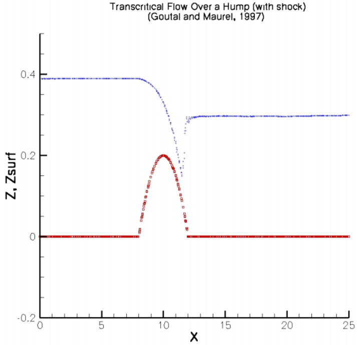


图: 绕凸包流动
flow over a hump

边界条件 Boundary Conditions

边界条件的作用

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

数值问题中常见的边界条件

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

边界条件 Boundary Conditions

边界条件的作用

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

数值问题中常见的边界条件

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

边界条件的作用

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

数值问题中常见的边界条件

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

边界条件 Boundary Conditions

边界条件的作用

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

数值问题中常见的边界条件

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

边界条件 Boundary Conditions

边界条件的作用

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

数值问题中常见的边界条件

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

循环边界条件(cyclic, periodic)

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

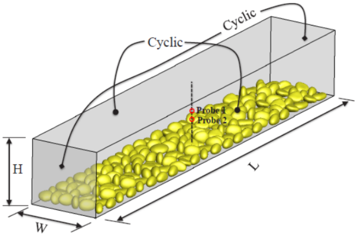


图: 充分发展明渠流动
fully developed channel flow

B.C. in OpenFOAM®

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

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

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

Most boundary conditions are implemented in
`$FOAM_SRC/finiteVolume/fields/fvPatchFields`

B.C. in OpenFOAM®

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

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

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

Most boundary conditions are implemented in
`$FOAM_SRC/finiteVolume/fields/fvPatchFields`

B.C. in OpenFOAM®

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

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

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

Most boundary conditions are implemented in
`$FOAM_SRC/finiteVolume/fields/fvPatchFields`

不合理BC设置

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

例如：

$$\frac{d^2T}{dx^2} + T = 0 \tag{52}$$

上式的解取决于边界条件

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

初始条件 Initial Condition

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

OpenFOAM® 中

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

初始条件 Initial Condition

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

OpenFOAM® 中

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

Thank you.

欢迎私下交流，请勿上传网络，谢谢！