

*А.А. Анিকেев, А.М. Молчанов, Д.С. Янышев*

**Основы вычислительного теплообмена и  
гидродинамики**

Учебное пособие

## Оглавление

1	Введение .....	6
1.1	Основные сведения из векторного анализа .....	6
1.2	Тензорная запись уравнений механики жидкости и газа .....	11
1.3	Основные уравнения механики жидкости и газа .....	15
2	Основные методы численного решения задач тепломассообмена.	25
3	Основы метода конечных объёмов .....	28
3.1	Простой пример.....	28
3.2	Уравнение энергии.....	30
3.3	Дискретные аналоги поверхностных интегралов .....	32
3.4	Дискретные аналоги объёмных интегралов .....	38
3.5	Граничные условия .....	38
3.6	Производная по времени .....	43
3.7	Общий алгоритм решения задачи.....	47
4	Расчёт поля течения.....	49
4.1	Интегрирование по контрольному объёму уравнения движения .....	49
4.2	Расчёт поля давления.....	50
4.3	Подходы и проблемы.....	54
5	Турбулентность: проблемы моделирования и подходы к их решению .....	56
5.1	Феномен турбулентности .....	56
5.2	Явления отрыва .....	59
5.3	Осреднённое движение. Уравнения Рейнольдса.....	62
5.4	Гипотеза Буссинеска .....	66
5.5	Путь смешения Л.Прандтля. Алгебраические модели .....	68
5.6	Модель $k-\varepsilon$ . Дифференциальные модели .....	69

5.7	О моделировании течений вблизи стенки .....	71
5.8	Общие данные о некоторых моделях турбулентности .....	74
5.9	Более сложные модели турбулентности .....	78
6	Особенности расчёта химически реагирующих течений .....	81
6.1	Основные положения .....	81
6.2	Основные уравнения .....	83
6.3	Жёсткие системы .....	91
6.4	Решение жёстких систем применительно к задачам химической кинетики .....	102
6.5	Метод расщепления для системы уравнений переноса химических компонентов .....	105
7	Метод конечных элементов в тепловых расчётах .....	107
7.1	Основные понятия вариационного исчисления .....	107
7.2	Основные концепции МКЭ на примере решения задач теплопроводности .....	110
7.3	Выбор типа элементов и составление функций формы .....	114
7.4	Система уравнений МКЭ .....	117
Приложение 1. Расчёт двумерной задачи теплопроводности методом конечных элементов .....		123
П.1.	Постановка задачи .....	123
П.2.	Локальная нумерация узлов .....	124
П.3.	Составление системы уравнений метода конечных элементов. ....	129
П.4.	Пример реализации расчета стационарного температурного поля методом конечных элементов .....	139
Заключение .....		147
Список использованной литературы .....		148

# 1 Введение

В настоящее время с интенсивным развитием компьютерных технологий особое значение приобретает математическое моделирование различных физических процессов. В задачах тепло- и массообмена численный эксперимент приобрел сейчас важность сравнимую с важностью эксперимента натурального.

Целью данного пособия является ознакомление читателей с основами моделирования процессов теплопроводности и конвективного теплообмена. Часть материала, представленного в пособии, носит описательный характер и служит для создания представления о существующих на сегодняшний день моделях. Такой подход к изложению оправдывается тем, что сейчас существует целый ряд коммерческих пакетов программ по вычислительной гидродинамике и теплопередаче. Однако их использование требует знания основных подходов к моделированию течений жидкостей и газов и применимости этих подходов при решении конкретной задачи и использовании имеющихся вычислительных мощностей.

В связи с этим уделено особое внимание сопоставлению русскоязычных и англоязычных терминов и названий, поскольку большинство существующих пакетов программ по вычислительной теплопередаче и гидродинамике выпускаются исключительно на английском языке и не имеют локализации.

Для понимания сути математических выкладок от читателя требуется знание некоторых основ векторного анализа. Основные сведения оттуда представлены ниже.

## 1.1 Основные сведения из векторного анализа

### Скалярное и векторное произведение векторов

Скалярное произведение двух векторов есть скаляр.

Пусть имеется вектор  $\mathbf{a}$  с координатами  $a_x, a_y, a_z$  и вектор  $\mathbf{b}$  с координатами  $b_x, b_y, b_z$ . Тогда скалярное произведение этих векторов будет равно

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z = |\mathbf{a}| \cdot |\mathbf{b}| \cos(\widehat{\mathbf{a} \mathbf{b}}) \quad (1.1)$$

Векторное произведение двух векторов является вектором и вычисляется следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{a} \times \mathbf{b} &= (a_y b_z - a_z b_y) \mathbf{i} + (a_z b_x - a_x b_z) \mathbf{j} + (a_x b_y - a_y b_x) \mathbf{k} = \\ &= \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ a_x & a_y & a_z \\ b_x & b_y & b_z \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (1.2)$$

Модуль векторного произведения равен произведению модулей векторов на синус угла между ними  $|\mathbf{a} \times \mathbf{b}| = |\mathbf{a}| \cdot |\mathbf{b}| \sin(\widehat{\mathbf{a} \mathbf{b}})$ .

### Оператор набла (оператор Гамильтона)

Оператор набла (оператор Гамильтона) записывается следующим образом:

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{k} \quad (1.3)$$

где  $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$  - единичные векторы.

Если скалярно умножить оператор Набла на векторную величину, то мы получим *дивергенцию* данного вектора:

$$\nabla \cdot \mathbf{a} = \operatorname{div} a = \frac{\partial a_x}{\partial x} + \frac{\partial a_y}{\partial y} + \frac{\partial a_z}{\partial z} \quad (1.4)$$

$a_x, a_y$  и  $a_z$  - проекции вектора  $\mathbf{a}$  на соответствующие оси координат.

С точки зрения физики, дивергенция векторного поля является показателем того, в какой степени данная точка пространства является источником или стоком этого поля:

- $\operatorname{div}(\mathbf{a}) > 0$  - точка является источником поля  $\mathbf{a}$ .
- $\operatorname{div}(\mathbf{a}) < 0$  – точка является стоком поля  $\mathbf{a}$ .
- $\operatorname{div}(\mathbf{a}) = 0$  - стоков и источников нет, либо они компенсируют друг друга.

Если умножить оператор набла на скаляр, получается *градиент* этого скаляра:

$$\nabla \cdot \phi = \operatorname{grad} \phi = \frac{\partial \phi}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \mathbf{j} + \frac{\partial \phi}{\partial z} \mathbf{k} \quad (1.5)$$

В различных отраслях физики используется понятие градиента различных физических полей.

Например, *градиент концентрации* — нарастание или уменьшение по какому-либо направлению концентрации растворённого вещества, *градиент температуры* — увеличение или уменьшение по направлению температуры среды и т. д.

Третьим важнейшим оператором векторного анализа является ротор или вихрь. Как уже видно из названия, он характеризует вихревую составляющую векторного поля, показывая, насколько закручено поле в данной точке. В русскоязычной литературе оператор ротора обозначается как  $\operatorname{rot}(\mathbf{a})$ , в англоязычной – как  $\operatorname{curl}(\mathbf{a})$ .

Ротор есть вектор со следующими координатами (декартова система координат):

$$\operatorname{rot} \mathbf{a} = \left( \frac{\partial a_z}{\partial y} - \frac{\partial a_y}{\partial z} \right) \mathbf{i} + \left( \frac{\partial a_x}{\partial z} - \frac{\partial a_z}{\partial x} \right) \mathbf{j} + \left( \frac{\partial a_y}{\partial x} - \frac{\partial a_x}{\partial y} \right) \mathbf{k} \quad (1.6)$$

Для удобства запоминания можно представить ротор в виде векторного произведения оператора набла и вектора поля:

$$\operatorname{rot} \mathbf{a} = \nabla \times \mathbf{a} = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ a_x & a_y & a_z \end{vmatrix} \quad (1.7)$$

### Оператор Лапласа

Оператор Лапласа или лапласиан записывается следующим образом:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (1.8)$$

Можно показать, что оператор Лапласа есть скалярное умножение оператора набла на самого себя, или, что есть то же самое, дивергенция градиента:

$$\Delta a = \nabla \cdot \nabla a = \nabla^2 a = \operatorname{div}(\operatorname{grad} a) \quad (1.9)$$

Наряду с лапласианом скалярной функции, существует так же и лапласиан вектора. Он обозначается точно так же и тоже представляет собой сумму вторых производных. При этом, однако, лапласиан векторной функции является вектором, а не скаляром.

$$\Delta \mathbf{a} = \nabla^2 \mathbf{a} = \operatorname{grad}(\operatorname{div} \mathbf{a}) - \operatorname{rot}(\operatorname{rot} \mathbf{a}) \equiv \frac{\partial^2 \mathbf{a}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{a}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{a}}{\partial z^2} \quad (1.10)$$

Некоторые часто встречающиеся соотношения:

$$\left. \begin{aligned}
 \operatorname{div}(\phi \cdot \mathbf{a}) &= \phi \cdot \operatorname{div} \mathbf{a} + \mathbf{a} \cdot \operatorname{grad} \phi = \phi \nabla \cdot \mathbf{a} + \mathbf{a} \cdot \nabla \phi \\
 (\mathbf{a} \cdot \nabla) \mathbf{a} &= a_x \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial x} + a_y \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial y} + a_z \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial z} = \operatorname{grad} \left( \frac{a^2}{2} \right) + \operatorname{rot} \mathbf{a} \times \mathbf{a} \\
 \operatorname{rot}(\operatorname{grad} \phi) &= 0 \\
 \operatorname{div}(\operatorname{rot} \mathbf{a}) &= 0
 \end{aligned} \right\} \quad (1.11)$$

### Поток вектора

Поток вектора  $\mathbf{a}$  через элементарную площадку  $dS$  определяется как  $\mathbf{a} \cdot n dS$  или  $\mathbf{a} \cdot d\mathbf{S}$  ( $d\mathbf{S} = \mathbf{n} \cdot dS$ ), где  $\mathbf{n}$  – единичный вектор нормали к площадке.

$$\Phi = \int_S \mathbf{a} \cdot d\mathbf{S} \quad (1.12)$$

### Теорема Остроградского-Гаусса

Рассмотрим векторное поле  $\mathbf{a}$ , проходящее через объём  $V$ , ограниченный поверхностью  $S$ . Тогда поток вектора  $\mathbf{a}$  через поверхность  $S$  будет равен интегралу дивергенции этого вектора по объёму  $V$ .

$$\oint_S \mathbf{a} \cdot d\mathbf{S} = \int_V \operatorname{div} \mathbf{a} dV \quad (1.13)$$

Физически это можно интерпретировать следующим образом: поток векторного поля через замкнутую поверхность зависит от наличия в объёме, ограничивающем эту поверхность источников или стоков рассматриваемого поля. Если источников и стоков в данном объёме нет, или они компенсируют друг друга, то поток вектора через замкнутую поверхность равен нулю, т.е. сколько в объём «втекает», столько из него и «вытекает».



## Производные от формулы Остроградского-Гаусса

Можно показать (см. например [7]), что через поверхностный интеграл можно выразить так же и объёмные интегралы от градиента и ротора. Приведём здесь эти формулы:

$$\int_V \operatorname{grad} \phi = \oint_S \phi \cdot d\mathbf{S} \quad (1.14)$$

$$\int_V \operatorname{rot} \mathbf{a} = \oint_S d\mathbf{S} \times \mathbf{a} \quad (1.15)$$

## 1.2 Тензорная запись уравнений механики жидкости и газа

В настоящее время в литературе очень широко используется тензорная запись уравнений механики сплошных сред. С целью ознакомления читателя с таким видом записи здесь приводятся основные её правила. При этом теория тензорного исчисления здесь излагаться не будет. Интересующиеся могут подробно ознакомиться с нею в специальной литературе, например, в [3, 6].

Одной из причин применения тензорной формы записи является то, что она более короткая. Часто это помогает лучше уловить физический смысл математического выражения.

Для начала рассмотрим самый простой пример. Возьмём два вектора  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$ . Аналитически эти вектора могут быть записаны следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{a} &= a_1 \mathbf{e}_1 + a_2 \mathbf{e}_2 + a_3 \mathbf{e}_3 \\ \mathbf{b} &= b_1 \mathbf{e}_1 + b_2 \mathbf{e}_2 + b_3 \mathbf{e}_3 \end{aligned} \quad (1.16)$$

где  $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$  – единичные координатные векторы.

Теперь, если мы захотим аналитически вычислить вектор  $\mathbf{c}$ , который будет представлять сумму этих векторов, то нам нужно будет записать:

$$\mathbf{c} = (a_1 + b_1)\mathbf{e}_1 + (a_2 + b_2)\mathbf{e}_2 + (a_3 + b_3)\mathbf{e}_3 \quad (1.16)$$

Однако эта запись довольно длинная. Её можно упростить, если мы введём индекс  $i$ , который последовательно пробегает значения от 1 до 3. Тогда вектора  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$  можно будет записать как  $a_i$  и  $b_i$ . А вектор  $\mathbf{c}$  запишется как:

$$c_i = a_i + b_i \quad (1.17)$$

Точно так же мы можем записать сумму двух квадратных матриц. Допустим, мы хотим записать матрицу  $C$ , элементы которой есть суммы соответствующих элементов матриц  $A$  и  $B$ . Для этого воспользуемся двумя индексами –  $i$  и  $j$ , которые так же пробегает значения от 1 до 3. Тогда

$$C_{ij} = A_{ij} + B_{ij} \quad (1.18)$$

Диапазон значений, которые пробегает индексы обычно оговаривается в самом начале статьи (монографии, учебника) и более не оговаривается. Для трёхмерных задач это всегда будет от 1 до 3, для четырёхмерных (задачи теории относительности) – от 1 до 4 и т.д. Для обозначения индексов используют латинские буквы из середины алфавита ( $i, j, k, l, m, p, q, r$ ), однако обычно не принято прибегать к буквам из начала ( $a, b, c, \dots$ ) и конца алфавита ( $u, v, w, x, y, z$ ). Так же в качестве индексов могут быть использованы греческие буквы  $\alpha, \beta, \gamma$ .

Одним из самых главных в тензорной записи является свёртка или условие о суммировании, введённое Эйнштейном.

### **Правило Эйнштейна**

Если в одночленном выражении имеются два одинаковых индекса, т. е. индекс повторяется, то этот индекс называется *немым*. Наличие немого индекса означает суммирование по всему диапазону, по которому пробегает индекс, т. е. в нашем случае от 1 до 3. Результат этой операции называется

сверткой; часто саму эту операцию называют также сверткой, иногда свертыванием [3].

$$a_{ii} = a_{11} + a_{22} + a_{33} \quad (1.19)$$

То же самое можно было бы написать, используя знак суммы:  $\sum_{i=1}^3 a_{ii}$ ,

однако такая запись более длинная.

Используя свёртку, можно так же записать операцию скалярного умножения векторов:

$$a_i b_i = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 \quad (1.20)$$

Или операцию дивергенции вектора:

$$\frac{\partial a_i}{\partial x_i} = \frac{\partial a_1}{\partial x_1} + \frac{\partial a_2}{\partial x_2} + \frac{\partial a_3}{\partial x_3} \quad (1.21)$$

Следует также заметить, что повторение индекса более одного раза не допускается правилом. Т.е. запись вида  $a_{kkk}$  не имеет смысла.

### **Символ Кронекера**

Этот символ очень часто используется в тензорном исчислении. Он записывается следующим образом:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{при } i = j \\ 0, & \text{при } i \neq j \end{cases} \quad (1.22)$$

Фактически он представляет собой единичную матрицу, размерность которой зависит от того диапазона, который пробегают индексы  $i$  и  $j$ .

### **Символ Леви-Чевиты**

Символ Леви-Чевиты, или абсолютно антисимметричный единичный тензор записывается следующим образом:

$$e_{ijk} = \begin{cases} 1, & \text{если элемент имеет чётную перестановку индексов} \\ -1, & \text{если элемент имеет нечётную перестановку индексов} \\ 0, & \text{при } i = j, i = k, j = k \end{cases} \quad (1.23)$$

Чтобы лучше понять, что значит чётные и нечётные перестановки, рассмотрим всевозможные перестановки комбинации чисел 1,2,3. Всего таких перестановок возможно  $3! = 6$ .

1,2,3 – чётная перестановка

1,3,2 – нечётная перестановка

3,1,2 – чётная перестановка

3,2,1 – нечётная перестановка

2,3,1 – чётная перестановка

2,1,3 – нечётная перестановка.

Для наглядности распишем символ Леви-Чевиты:

$$e_{ij1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}; \quad e_{ij2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad e_{ij3} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.24)$$

Основные формулы векторной алгебры и анализа в тензорных обозначениях

Векторные обозначения	Тензорные обозначения
1). Вектор	
<b>a</b>	$a_i$
2). Модуль вектора	
<b> a </b>	$\sqrt{a_i a_i}$
3). Скалярное произведение	
<b>a · b</b>	$a_i b_i$

Векторные обозначения	Тензорные обозначения
4). Векторное произведение	
$\mathbf{a} \times \mathbf{b}$	$e_{ikl} a_k b_l$
5). Градиент	
$\text{grad } \phi$	$\frac{\partial \phi}{\partial x_p}$
6). Дивергенция	
$\text{div } \mathbf{a}$	$\frac{\partial a_q}{\partial x_q}$
7). Ротор	
$\text{rot } \mathbf{a}$	$e_{ijk} \frac{\partial a_k}{\partial x_j}$
8). Лапласиан	
$\nabla^2 \phi = \Delta \phi$	$\frac{\partial}{\partial x_p} \left( \frac{\partial \phi}{\partial x_p} \right)$

(1.25)

### 1.3 Основные уравнения механики жидкости и газа

Здесь мы кратко рассмотрим вид уравнений гидродинамики и теплообмена, а также приведём их вывод.

## Уравнение неразрывности (continuity equation)

Его также называют уравнением сохранения массы. Оно выводится из очень простых предположений.

Рассмотрим объём  $V$ , ограниченный некоторой произвольной поверхностью  $S$  (см. Рисунок 1.1)

Каким образом может измениться масса данного объёма? Очевидно, что только за счёт втекающего и вытекающего из него потока жидкости. Тогда скорость изменения массы в объёме будет равна потоку (расходу) жидкости через данный объём.

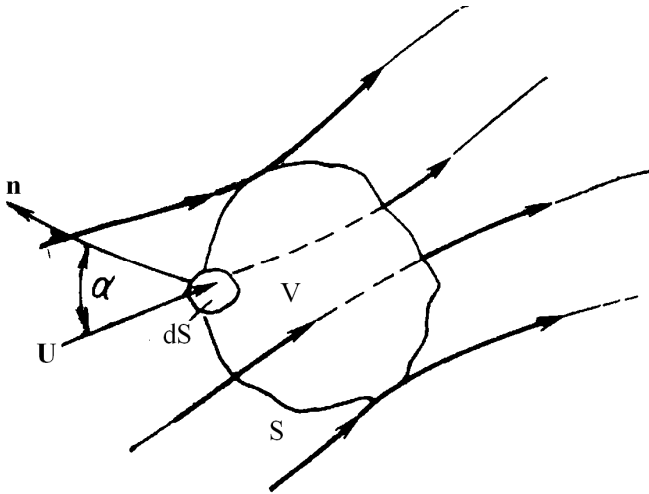


Рисунок 1.1 К выводу уравнения неразрывности

Известно, что расход жидкости с плотностью  $\rho$ , протекающей со скоростью  $U$  через сечение  $F$  вычисляется по формуле:

$$G = \rho UF \tag{1.26}$$

Тогда поток через малую площадку  $dS$  будет равен  $\rho \mathbf{U} \cdot d\mathbf{S}$ . Интегрируя по всей поверхности  $S$ , получим:

$$-\frac{dm}{d\tau} = \oint_S \rho \mathbf{U} \cdot d\mathbf{S} \quad (1.27)$$

Учитывая, что  $m = \int_V \rho dV$ , получим:

$$-\int_V \frac{\partial \rho}{\partial \tau} dV = \oint_S \rho \mathbf{U} \cdot d\mathbf{S} \quad (1.28)$$

Теперь, используя теорему Остроградского-Гаусса (формула (1.13)), получим:

$$\begin{aligned} -\int_V \frac{\partial \rho}{\partial \tau} dV &= \int_V \operatorname{div}(\rho \mathbf{U}) dV \\ \int_V \left( \frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{U}) \right) dV &= 0 \end{aligned} \quad (1.29)$$

Интеграл по произвольному объёму от функции может быть равен нулю, только если сама функция равна нулю.

Отсюда получаем уравнение неразрывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{U}) = 0 \quad (1.30)$$

В тензорных обозначениях оно запишется следующим образом:

$$\frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \frac{\partial \rho U_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1.31)$$

В несжимаемой жидкости плотность постоянна, т.е.  $\frac{\partial \rho}{\partial \tau} = 0$  и уравнение

(1.30) можно будет записать в виде:

$$\operatorname{div} \mathbf{U} = 0 \text{ или } \frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1.32)$$

### Уравнение движения (momentum equation)

Уравнение движение сплошной среды фактически представляет собой второй закон Ньютона записанный для элементарного объёма.

Пусть элементарный объём представляет собой параллелепипед массы  $dm$  с гранями  $dx$ ,  $dy$  и  $dz$ . Запишем для него второй закон Ньютона:

$$dm \frac{d\mathbf{U}}{d\tau} = \rho dV \cdot \frac{d\mathbf{U}}{d\tau} = \mathbf{R} \quad (1.33)$$

где  $\mathbf{R}$  – вектор результирующей силы, действующей на объём.

Теперь перед нами встаёт вопрос – а какие именно силы действуют на элементарный объём жидкости? Начнём с того, что все силы можно сразу разделить на объёмные и поверхностные. К объёмным силам относят силы тяготения, электрические силы, магнитные силы и т.п. Не вдаваясь в природу объёмной силы, будем обозначать её  $\mathbf{J}$ .

Поверхностные силы можно представить в виде *тензора напряжений*:

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad (1.34)$$

Здесь напряжения, с одинаковыми индексами ( $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}$ ) суть *нормальные напряжения* (т.е. они направлены *по нормали* к поверхности).

Все остальные напряжения – *касательные* (они, соответственно, направлены по касательной). Причём можно показать, что

$$\sigma_{xy} = \sigma_{yx}, \quad \sigma_{xz} = \sigma_{zx}, \quad \sigma_{yz} = \sigma_{zy}.$$

Рассмотрим вывод уравнения движения в проекции на ось  $x$ .



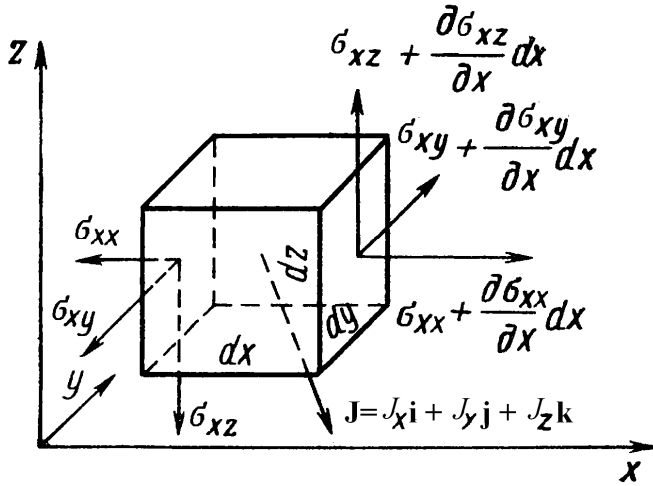


Рисунок 1.2 К выводу уравнения движения

На Рисунок 1.2 представлены все силы, действующие на элементарный объём. Запишем выражение для равнодействующей этих сил:

$$\begin{aligned}
 R_x = J_x \rho \cdot dV + \left( \sigma_{xx} + \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} dx - \sigma_{xx} \right) dydz + \\
 + \left( \sigma_{xy} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} dy - \sigma_{xy} \right) dx dz + \left( \sigma_{xz} + \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial z} dz - \sigma_{xz} \right) dx dy
 \end{aligned}
 \tag{1.35}$$

Произведя соответствующие выкладки для других осей, расписав полную производную в выражении (1.33) как

$$\frac{d\mathbf{U}}{d\tau} = \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \tau} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} = \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \tau} + U_x \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} + U_y \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial y} + U_z \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial z}
 \tag{1.36}$$

и разделив всё на  $dV = dx dy dz$ , получим уравнения движения в напряжениях:

$$\begin{aligned}
\rho \left( \frac{\partial U_x}{\partial \tau} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) U_x \right) &= \rho J_x + \left( \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial z} \right) \\
\rho \left( \frac{\partial U_y}{\partial \tau} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) U_y \right) &= \rho J_y + \left( \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial z} \right) \\
\rho \left( \frac{\partial U_z}{\partial \tau} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) U_z \right) &= \rho J_z + \left( \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{zy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} \right)
\end{aligned} \tag{1.37}$$

Заметим также, что при использовании тензорной нотации можно было бы вывести это уравнение намного быстрее и записать гораздо компактнее.

Результирующая поверхностных сил  $R_S$ , действующих на некоторый объём, есть интеграл от тензора (1.34) по поверхности этого объёма:

$$R_S = \int_S \sigma_{ij} dS_j \tag{1.38}$$

Теорема Остроградского-Гаусса (формула (1.13)) применима и в данном случае. Преобразовав поверхностный интеграл в объёмный, получим:

$$R_S = \int_V \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} dV \tag{1.39}$$

С учётом (1.36) и (1.39) перепишем второй закон Ньютона (формула (1.33)):

$$\int_V \rho \left( \frac{\partial U_i}{\partial \tau} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right) dV = \int_V \rho J_i dV + \int_V \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} dV \tag{1.40}$$

Отсюда приходим к окончательной формуле:

$$\rho \left( \frac{\partial U_i}{\partial \tau} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right) = \rho J_i + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \tag{1.41}$$

Очевидно, что данное равенство полностью совпадает с уравнениями (1.37).

Однако пользоваться уравнениями (1.37) невозможно, поскольку напряжения, действующие на элементарный объём неизвестны. Напряжения можно выразить через скорости деформации среды и через давление.

Жидкости, у которых напряжения зависят от деформаций линейно, называют ньютоновскими. Касательные напряжения в ньютоновской жидкости выражаются следующим образом ( $\mu$  здесь – коэффициент динамической вязкости):

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} = \sigma_{yx} &= \mu \left( \frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x} \right); & \sigma_{xz} = \sigma_{zx} &= \mu \left( \frac{\partial U_x}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial x} \right); \\ \sigma_{zy} = \sigma_{yz} &= \mu \left( \frac{\partial U_z}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (1.42)$$

Нормальные напряжения вызывают деформацию жидкости не только в направлении их действия, но и в перпендикулярных, приводя к деформациям сдвига и объемной. Наглядной моделью такого явления может служить растяжение резинового стержня, уменьшающегося при этом в диаметре [17].

Исследования показали, что нормальные напряжения можно представить в следующей форме:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= -p + 2\mu \left( \frac{\partial U_x}{\partial x} \right) - \frac{2}{3} \mu \operatorname{div} \mathbf{U} \\ \sigma_{yy} &= -p + 2\mu \left( \frac{\partial U_y}{\partial y} \right) - \frac{2}{3} \mu \operatorname{div} \mathbf{U} \\ \sigma_{zz} &= -p + 2\mu \left( \frac{\partial U_z}{\partial z} \right) - \frac{2}{3} \mu \operatorname{div} \mathbf{U} \end{aligned} \quad (1.43)$$

При использовании тензорной нотации можно было бы записать выражение для напряжений намного короче:

$$\sigma_{ij} = \mu \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \right) - p \delta_{ij} \quad (1.44)$$

Первый член в этом выражении представляет собой вязкие напряжения, второй – напряжения, связанные с давлением.

Подставив выражения для напряжений в (1.37), получим:

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \tau} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} \right) = \rho \mathbf{J} - \nabla P + \mu \Delta \mathbf{U} + \frac{1}{3} \mu \operatorname{grad}(\operatorname{div} \mathbf{U}) \quad (1.45)$$

В тензорной нотации оно будет выглядеть как:

$$\rho \left( \frac{\partial U_k}{\partial \tau} + U_j \frac{\partial U_k}{\partial x_j} \right) = \rho J_k - \frac{\partial P}{\partial x_k} + \mu \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial U_k}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_k} - \frac{2}{3} \delta_{jk} \frac{\partial U_l}{\partial x_l} \right) \quad (1.46)$$

Если мы рассматриваем течение несжимаемой жидкости,  $\operatorname{div} \mathbf{U} = 0$ .

Тогда уравнение движения можно записать в виде:

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \tau} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} \right) = \rho \mathbf{J} - \nabla P + \mu \Delta \mathbf{U}$$

или

$$(1.47)$$

$$\rho \left( \frac{\partial U_k}{\partial \tau} + U_j \frac{\partial U_k}{\partial x_j} \right) = \rho J_k - \frac{\partial P}{\partial x_k} + \mu \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial U_k}{\partial x_j} \right)$$

### Уравнение энергии (energy equation)

Уравнение энергии фактически представляет собой закон сохранения тепла, записанный для элементарного объёма.

Чтобы вывести это уравнение, будем рассуждать следующим образом. Каким образом может измениться энтальпия  $h = c_p T$  [Дж/кг] объёма жидкости? Самое очевидное – из-за потока тепла за счёт теплопроводности. По закону Фурье поток тепла через единичную поверхность (плотность теплового потока) определяется как ( $\lambda$  – коэффициент теплопроводности):

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T \quad (1.48)$$

Тогда изменение энтальпии в объёме будет равно суммарному тепловому потоку через поверхность этого объёма:

$$\int_V \rho c_p \frac{dT}{d\tau} dV = \oint_S \mathbf{q} \cdot d\mathbf{S} \quad (1.49)$$

Воспользовавшись теоремой Остроградского-Гаусса и подставив выражение для плотности теплового потока, получим:

$$\rho c_p \frac{dT}{d\tau} = \lambda \Delta T \quad (1.50)$$

Если жидкий объём неподвижен, то  $\frac{dT}{d\tau} = \frac{\partial T}{\partial \tau}$ , если жидкость движется,

$$\text{то } \frac{dT}{d\tau} = \frac{\partial T}{\partial \tau} + \mathbf{U} \cdot \nabla T .$$

Что же ещё может изменить энтальпию жидкого объёма? В жидкости может возникнуть объёмное тепловыделение (например, вследствие химической реакции). Обозначим объёмное тепловыделение через  $q_v$ . Тогда уравнение энергии запишется в виде:

$$\rho c_p \left( \frac{\partial T}{\partial \tau} + \mathbf{U} \cdot \nabla T \right) = \lambda \Delta T + q_v \quad (1.51)$$

Другим важным фактором, влияющим на энтальпию жидкого объёма, являются силы проталкивания  $\frac{dp}{\rho}$ . Их влияние на энтальпию напрямую следует из первого начала термодинамики ( $dQ = dh - dp / \rho$ , где  $dQ$  – количество теплоты, измеряемое в Дж/кг).

Третьим фактором является наличие работы сил трения. Часть энергии движущейся среды из-за действия этих сил будет переходить в тепло. Часто работу сил трения обозначают как  $\mu \cdot \Phi$ , где  $\Phi$  – диссипативная функция, которая записывается как:

$$\Phi = 2 \left[ \left( \frac{\partial U_x}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial U_y}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial U_z}{\partial z} \right)^2 \right] + \left( \frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial U_z}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial U_x}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial x} \right)^2 - \frac{2}{3} (\operatorname{div} \mathbf{U})^2 \quad (1.52)$$

В тензорных обозначениях она записывается следующим образом:

$$\Phi = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_k} + \frac{\partial U_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial U_l}{\partial x_l} \right)^2 \quad (1.53)$$

Тогда наиболее общее уравнение энергии примет вид:

$$\rho c_p \left( \frac{\partial T}{\partial \tau} + \mathbf{U} \cdot \nabla T \right) = \lambda \Delta T + q_v - \frac{dP}{d\tau} + \mu \cdot \Phi \quad (1.54)$$

Или то же самое в тензорной нотации:

$$\rho c_p \left( \frac{\partial T}{\partial \tau} + U_k \cdot \frac{\partial T}{\partial x_k} \right) = \lambda \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + q_v - \frac{dP}{d\tau} + \mu \cdot \Phi \quad (1.55)$$

Если жидкость несжимаема и скорости её течения невелики, то два последних члена можно не учитывать и тогда уравнение (1.55) превращается в уравнение (1.51).

## 2 Основные методы численного решения задач теплообмена

Как известно, процессы тепло- и массообмена с точки зрения механики сплошных сред могут быть описаны системой нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных. Эту систему уравнений принято называть уравнениями Навье-Стокса.

Для примера ещё раз запишем систему уравнений для неизотермического (с теплообменом) течения несжимаемой жидкости в декартовых прямоугольных координатах. Она будет состоять из уравнений неразрывности (2.1), движения (2.2), и энергии (2.3).

$$\nabla \mathbf{U} = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \tau} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} = \mathbf{J} - \frac{1}{\rho} \nabla P + \nu \Delta \mathbf{U} \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) T = a \Delta T + \frac{q_v}{\rho c_p} \quad (2.3)$$

В данных уравнениях  $\mathbf{J}$  есть результирующий вектор массовых сил,  $\nu$  – кинематическая вязкость среды ( $\nu = \mu/\rho$ ),  $a$  – коэффициент температуропроводности ( $a = \lambda/\rho c_p$ ).

В тензорных обозначениях она будет выглядеть как:

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial U_k}{\partial \tau} + U_j \frac{\partial U_k}{\partial x_j} = J_k - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_k} + \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial U_k}{\partial x_j} \right) \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} + U_j \frac{\partial T}{\partial x_j} = a \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{q_v}{\rho c_p} \quad (2.6)$$

В наиболее общем случае система уравнений Навье-Стокса включает в себя уравнения неразрывности, движения, энергии и диффузии. Если в потоке происходят химические реакции, задача усложняется введением уравнений модели протекания данных реакций.

Уравнения Навье-Стокса могут быть решены в общем виде лишь в некоторых случаях и при ряде допущений. Общего аналитического решения системы этих уравнений пока не получено. При этом численные методы решения уравнений Навье-Стокса развиты довольно хорошо и на сегодняшний день нашли широкое применение в различных областях науки и техники. Численное моделирование является неотъемлемой частью процесса проектирования летательных аппаратов, двигательных установок, ракетной техники, автомобилей и т.д.

В настоящее время развиты три основных подхода к численному решению уравнений Навье-Стокса. Первый из них носит название Метода конечных разностей. По-английски – Finite Difference Method (FDM). Его суть заключается в прямой замене производных, входящих в исходные уравнения, их дискретными (разностными) аналогами. Решение ищется в узлах сетки, на которую разбивается расчётная область. Достоинством метода является относительная простота реализации, при этом однако с точки зрения физического смысла этот метод не очень нагляден. Другим недостатком этого метода являются особые требования к построению сетки, что часто усложняет процесс решения.

Второй называется Методом конечных объёмов или методом контрольного объёма. В англоязычной литературе он называется Finite Volumes Method (FVM). Основа метода заключается в том, что расчётная область с помощью сетки разбивается на совокупность конечных объёмов. Узлы, в которых ищется решение, находятся в центрах этих объёмов. Для каждого объёма должны выполняться законы сохранения массы, количества



движения и энергии. То есть, например, изменение во времени массы среды в контрольном объёме может происходить только за счёт внешнего потока массы, входящего в объём, или за счёт потока массы из данного объёма выходящего. Более подробно мы познакомимся с этим методом несколько позднее. Метод конечных объёмов применяется во многих вычислительных гидродинамических (CFD) пакетах, таких как FlowVision, Flow3d, PHOENICS и ряде других.

Третий метод решения – Метод Конечных Элементов (МКЭ). В англоязычной литературе его называют Finite Elements Method (FEM). Суть метода состоит в приближенном решении вариационной задачи. Для формулировки этой задачи напомним понятие *функционала*. Оператор  $I[f(x)]$  называется функционалом, заданным на некотором множестве функций, если каждой функции  $f(x)$  ставится в соответствие определённое числовое значение  $I[f(x)]$  [1]. Иными словами, функционал является как бы «функцией от функции». Часто функционалы имеют вид интегралов. Вариационная задача состоит в отыскании такой функции  $f(x)$ , которой бы соответствовало минимальное значение функционала  $I[f(x)]$ . Вид этого функционала различен для различных задач и подбирается специально.

В настоящее время Метод Конечных Элементов нашёл широкое применение при решении задач теплопроводности в твёрдых телах и при расчётах на прочность. Однако он может быть применён и к задачам течения жидкостей и газов (см. например [2]). Известны также методы, которые сочетают в себе черты метода конечных объёмов и метода конечных элементов [4, 5]. Сочетание этих методов позволяет использовать более широкий ряд расчётных сеток (тетраэдрические сетки, пирамиды, призмы, полиэдры), что необходимо при решении задач со сложной геометрией.

Этот подход используют CFD пакеты Ansys CFX, Ansys Fluent, Star-CD, Star-CCM+.

### 3 Основы метода конечных объёмов

#### 3.1 Простой пример

В качестве относительно простого примера рассмотрим основные принципы метода на уравнении неразрывности для сжимаемой жидкости.

$$\frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \text{div}(\rho \mathbf{U}) = 0 \quad (3.1)$$

Выделим контрольный объём жидкости, ограниченный параллелепипедом (см. Рисунок 3.1). Часто задача может быть сведена к двумерной постановке и тогда контрольным объёмом будет уже прямоугольник (см. Рисунок 3.2).

Проинтегрируем уравнение (3.1) по рассматриваемому объёму.

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial \tau} dV + \int_V \text{div}(\rho \mathbf{U}) dV \quad (3.2)$$

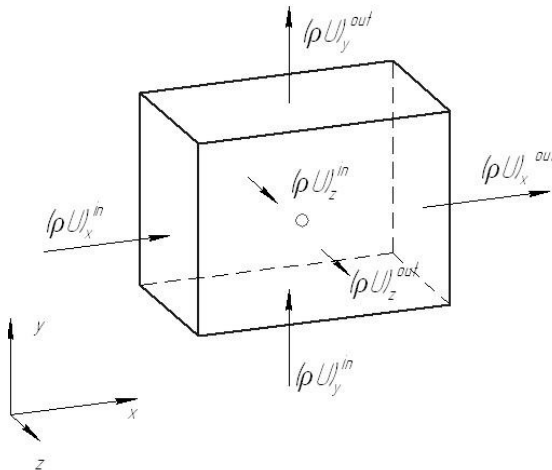


Рисунок 3.1 Контрольный объём в трёхмерной постановке задачи

Воспользовавшись теоремой Остроградского-Гаусса (формула (1.13)), получим:

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial \tau} dV + \int_S \rho \mathbf{U} \cdot d\mathbf{S} = 0 \quad (3.3)$$

Возможно, вы заметили, что когда мы выводили уравнения течения среды в п. 1.3, то мы тоже пользовались теоремой Остроградского-Гаусса, однако – в обратном направлении с тем, чтобы перейти от интегральных характеристик к дифференциальным.

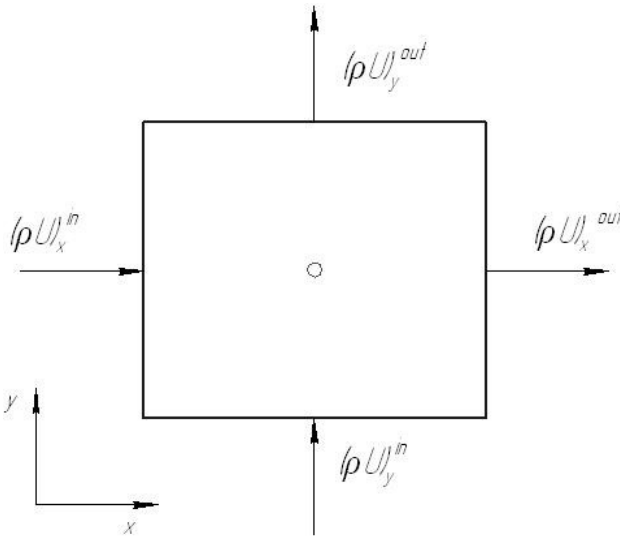


Рисунок 3.2 Контрольный объём в двумерной постановке задачи

Уравнения вида (3.3) являются основными в методе конечных объёмов. Фактически они представляют собой законы сохранения для контрольного объёма. Уравнение (3.3) есть закон сохранения массы. Его физический смысл

весьма прозрачен – масса контрольного объёма может измениться только за счёт потока жидкости, втекающей через его грани.

Если предположить, что профиль скорости на гранях равномерный, а изменение плотности во всех точках объёма происходит одинаково, то мы получим следующее *дискретное* (алгебраическое) уравнение сохранения массы для контрольного объёма:

$$-\frac{\partial \rho}{\partial \tau} dV = (\rho U_x^{out} - \rho U_x^{in}) S_{yz} + (\rho U_y^{out} - \rho U_y^{in}) S_{xz} + (\rho U_z^{out} - \rho U_z^{in}) S_{xy} \quad (3.4)$$

где  $S_{xy}$ ,  $S_{yz}$ ,  $S_{xz}$  – площади соответствующих граней объёма. Индексы in и out обозначают вход и выход соответственно. Такая аппроксимация достаточно часто используется, однако она далеко не единственная.

Также здесь встаёт проблема, как выразить величины  $\rho U_x^{in}$ ,  $\rho U_y^{in}$ ,  $\rho U_z^{in}$ ,  $\rho U_x^{out}$ ,  $\rho U_y^{out}$ ,  $\rho U_z^{out}$  через значения  $\rho U$  в узловых точках (которые, как уже говорилось ранее, находятся в середине каждого контрольного объёма).

Более подробно все эти вопросы мы рассмотрим далее.

## 3.2 Уравнение энергии

Рассмотрим уравнение (2.3) и выведем для него дискретный аналог. При этом будем считать, что поле скоростей в потоке нам заранее известно. Тогда задача сведётся лишь к отысканию поля температур. С задачей решения всей системы уравнений (2.1)-(2.3) мы ознакомимся несколько позднее.

Будем рассматривать задачу в двумерной постановке. Введём сетку с шагами  $\delta x$  и  $\delta y$ , представленную на Рисунок 3.3. Контрольный объём здесь обозначен буквой P и заштрихован. Стрелками показаны единичные вектора нормали к его граням. Буквы N, NE, E, EE и т.д. обозначают «стороны света» относительно рассматриваемого объёма. N – North (север), E – East (восток), S – South (Юг), W – West (запад). Такое обозначение сторон контрольного

объёма для ячеек прямоугольной формы является общепринятым и часто используется в литературе (например, в [4, 5]).

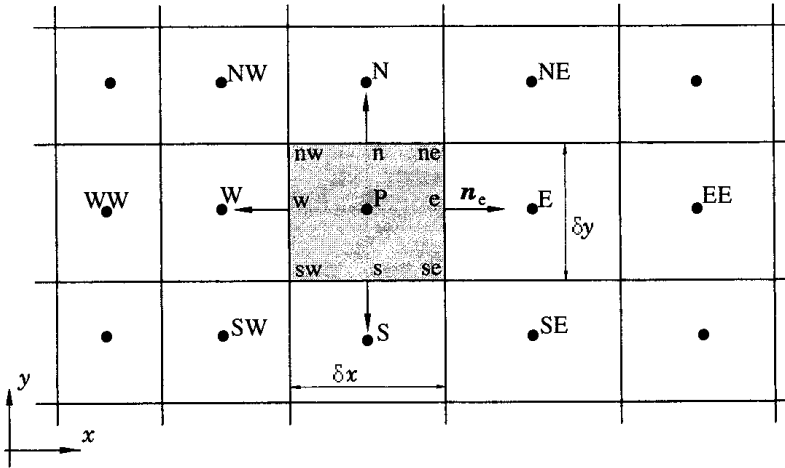


Рисунок 3.3 Контрольный объём в двумерной постановке в декартовых координатах

Интегрируя (2.3) по контрольному объёму, получим:

$$\int_V \frac{\partial T}{\partial \tau} dV + \int_V (\mathbf{U} \cdot \nabla) T dV = \int_V a \Delta T dV + \int_V \frac{q_v}{\rho c_p} dV \quad (3.5)$$

Применив теорему Остроградского-Гаусса (формула (1.13)), а также вспомнив, что оператор Лапласа есть дивергенция градиента (формула (1.9)), будем иметь:

$$\int_V \frac{\partial T}{\partial \tau} dV + \oint_S T \mathbf{U} \cdot d\mathbf{S} = a \oint_S \text{grad} T \cdot d\mathbf{S} + \int_V \frac{q_v}{\rho c_p} dV \quad (3.6)$$

Перепишем его следующим образом:

$$\int_V \frac{\partial T}{\partial \tau} dV = a \oint_S \text{grad } T \cdot \mathbf{dS} - \oint_S T \mathbf{U} \cdot \mathbf{dS} + \int_V \frac{q_v}{\rho c_p} dV \quad (3.7)$$

Слева стоит член, отвечающий за изменение температуры в объёме по времени. Первый член справа представляет собой тепловой поток за счёт теплопроводности, второй – конвективный тепловой поток, а третий – объёмное тепловыделение.

Таким образом, перед нами стоит задача получения дискретных аналогов объёмных и поверхностных интегралов уравнения (3.7). Кроме того нужно получить ещё и дискретный аналог производной по времени и градиента.

Начнём с рассмотрения поверхностных интегралов.

### 3.3 Дискретные аналоги поверхностных интегралов

Как известно интеграл по замкнутому контуру можно представить в виде суммы интегралов по каждой из частей контура:

$$\oint_S f dS = \sum_k \left( \int_{S_k} f dS \right) \quad (3.8)$$

В нашем случае мы имеем 4 стороны контрольного объёма. Таким образом, интеграл по замкнутому контуру будет равен сумме интегралов по каждой из сторон контрольного объёма. Надо заметить, что в нашем случае  $f$  может представлять собой либо  $T \mathbf{U}$ , либо  $\text{grad } T$ .

Далее мы будем рассматривать только одну из сторон контрольного объёма. Выражения для остальных сторон записываются аналогично. Главное, на что здесь следует обратить внимание – это на знак интеграла по той или иной стороне. Этот знак определяется скалярным произведением вектора на нормаль  $\mathbf{n}$  к элементарной площадке  $dS$  (см. формулы (1.1), (1.12) и комментарии к ним). Как известно, косинус нуля равен 1. Это соответствует случаю, когда векторы сонаправлены. Если векторы

направлены противоположно друг другу, то угол между ними составляет  $180^\circ$ , а косинус этого угла равен  $-1$ . Таким образом, составляя дискретный аналог уравнений гидродинамики и теплообмена, следует обращать внимание на то, как относительно рассматриваемой стороны контрольного объёма направлен вектор скорости. При этом направление вектора скорости выбирается в самом начале. Обычно предполагают, что проекции вектора скорости совпадают с направлениями осей координат. Если в процессе вычисления скорость в какой-либо точке расчётной получается отрицательной, значит в этой точке направление скорости противоположно направлению, которое было выбрано изначально.

Рассмотрим «восточную» сторону контрольного объёма (см. Рисунок 3.1).

Самая простая и очевидная аппроксимация интеграла вида (3.8) основывается на предположении постоянства  $f$  по всей поверхности рассматриваемой стороны:

$$\int_{S_e} f dS = f_e \cdot \int_{S_e} dS = f_e S_e \quad (3.9)$$

Эта аппроксимация имеет второй порядок точности [4].

Для повышения порядка точности можно использовать формулу Симпсона (см., например, [7]):

$$\int_{S_e} f dS = \frac{S_e}{6} (f_{ne} + 4f_e + f_{se}) \quad (3.10)$$

Здесь  $f_{ne}$  и  $f_{se}$  – значения в угловых точках контрольного объёма. Формула (3.10) даёт четвёртый порядок точности [4].

Здесь встаёт закономерный вопрос об определении величин в формуле (3.9) (об использовании формулы (3.10) мы поговорим ниже). Рассмотрим некоторые из вариантов. При этом вспомним, что  $f$  может представлять собой

конвективный  $f^c = \phi U$  или диффузионный  $f^d = \text{grad } \phi$  потоки (для уравнения энергии  $\phi = T$ ).

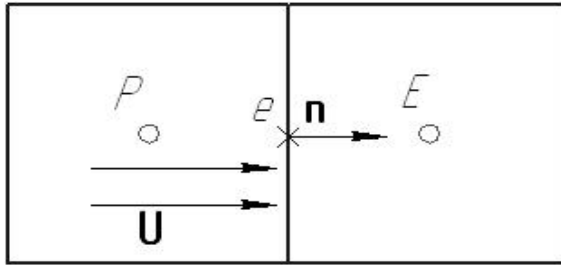
**Схема «против потока» (английское название – upwind differencing scheme, UDS).**

Она состоит в следующем:

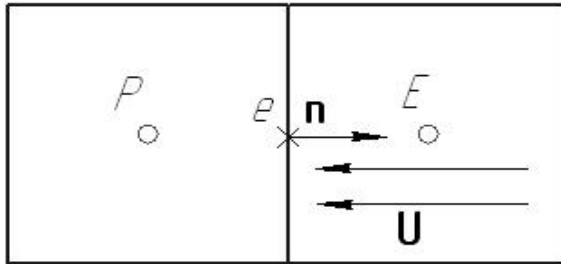
$$\phi_e = \begin{cases} \phi_P & \text{если } (\mathbf{U} \cdot \mathbf{n})_e > 0 \\ \phi_E & \text{если } (\mathbf{U} \cdot \mathbf{n})_e < 0 \end{cases} \quad \text{Текст 1}$$

$(\mathbf{U} \cdot \mathbf{n})_e$  здесь показывает, совпадают или нет направления нормали к стороне контрольного объёма и вектор скорости ( $(\mathbf{U} \cdot \mathbf{n})_e > 0$  - вектора совпадают по направлению,  $(\mathbf{U} \cdot \mathbf{n})_e < 0$  - вектора направлены в противоположные стороны). Схема называется схемой «против потока» именно поэтому: мы всегда выбираем значение, расположенное с «подветренной» стороны рассматриваемой части контрольного объёма (см. Рисунок 3.4).





$$\mathbf{U} \uparrow \uparrow \mathbf{n} \Rightarrow \phi_e = \phi_P$$



$$\mathbf{U} \uparrow \downarrow \mathbf{n} \Rightarrow \phi_e = \phi_E$$

Рисунок 3.4 Схема «против потока».

Для дискретизации по схеме «против потока» диффузионных членов будем иметь следующее выражение:

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = \begin{cases} \frac{\phi_E - \phi_P}{x_E - x_P}, & \text{если } (\mathbf{U} \cdot \mathbf{n})_e > 0 \\ \frac{\phi_P - \phi_E}{x_P - x_E}, & \text{если } (\mathbf{U} \cdot \mathbf{n})_e < 0 \end{cases} \quad (3.12)$$

Схема против потока хороша тем, что никогда не приводит к «нефизичным» решениям. Т.е., скажем, при течении холодного газа около горячей стенки использование этой схемы никогда не приведёт к такому

решению, при котором температура газа оказалась бы больше температуры стенки. Она «гасит» колебания решения (вид таких колебаний показан на Рисунок 3.5). Подробнее о свойствах этой схемы см., например, [5].

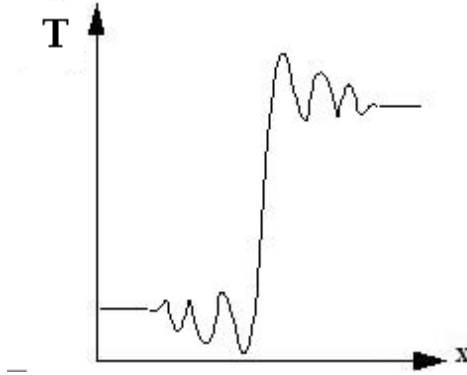


Рисунок 3.5 «Нефизичные» колебания решения

### Схема с линейной интерполяцией.

Если предположить, что между двумя соседними узлами (скажем, P и E)  $\phi$  (в нашем случае – температура) изменяется по линейному закону, то можно будет записать следующее выражение:

$$\phi_e = \phi_E l_e + \phi_P (1 - l_e) \quad (3.13)$$

где  $l_e$  представляет собой интерполяционный коэффициент:

$$l_e = \frac{x_e - x_P}{x_E - x_P} \quad (3.14)$$

Отсюда можно получить формулу для определения градиента, по сути совпадающую с формулой (3.12):

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = \frac{\phi_E - \phi_P}{x_E - x_P} \quad (3.15)$$

Схема с линейной интерполяцией также имеет второй порядок точности [4].

**Схема с квадратичной интерполяцией (QUICK - Quadratic Upwind Interpolation for Convective Kinematics).**

Данная схема является логическим продолжением схемы с линейной интерполяцией. Она интерполирует параметры между узлами с помощью парабол. Из курса численных методов известно, что для построения полинома степени  $n$  необходимо  $n+1$  точек. Таким образом, для интерполяции параболой требуется три точки. Исходя из природы конвекции, третья точка выбирается с противоположной стороны [4]. Тогда мы получим:

$$\phi_e = \phi_U + g_1(\phi_D - \phi_U) + g_2(\phi_U - \phi_{UU}) \quad (3.16)$$

Здесь  $D$  обозначает значение по потоку,  $U$  – значение против потока. Например, для потока, текущего из  $W$  в  $P$ ,  $D=W$ ,  $U=P$ ,  $UU=E$ .  $g_1$  и  $g_2$  – интерполяционные коэффициенты, зависящие от координат.

$$g_1 = \frac{(x_e - x_U)(x_e - x_{UU})}{(x_D - x_U)(x_D - x_{UU})}; \quad g_2 = \frac{(x_e - x_U)(x_D - x_e)}{(x_U - x_{UU})(x_D - x_{UU})} \quad (3.17)$$

Дифференцируя по  $x_e$ , получим:

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = g'_1(\phi_D - \phi_U) + g'_2(\phi_U - \phi_{UU}) \quad (3.18)$$

$$g'_1 = \frac{x_U - 2x_e + x_{UU}}{(x_D - x_U)(x_D - x_{UU})}; \quad g'_2 = \frac{x_D - 2x_e + x_U}{(x_D - x_U)(x_U - x_{UU})} \quad (3.19)$$

Схема с квадратичной интерполяцией несколько точнее, чем схема с линейной интерполяцией. Она имеет ошибку третьего порядка [4].

### **Схемы более высоких порядков.**

Очевидно, что возможны интерполяции и полиномами более высоких порядков. Для использования формулы (3.10) требуется интерполяция, по крайней мере, полиномом третьей степени:

$$\phi(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 \quad (3.20)$$

Для подобной интерполяции, как и для интерполяций полиномами более низких порядков, можно использовать интерполяционный полином Лагранжа (см., например, [7]).

## **3.4 Дискретные аналоги объёмных интегралов**

Самым распространённым способом здесь является предположение о том, что среднее по объёму значение подынтегральной функции равняется её значению в узле P.

Математически это может быть выражено следующим образом:

$$\int_V q dV = \bar{q} V \approx q_P V \quad (3.21)$$

Формулы с интерполяцией применяются гораздо реже, особенно в случаях, когда задача рассматривается в трёхмерной постановке.

## **3.5 Граничные условия**

Для получения решения любого уравнения в частных производных требуется задание условий на границе рассматриваемой области.

При решении задач конвективного теплообмена выделяют несколько типов граничных условий (boundary conditions):

Граничное условие на входе (inlet). Обычно на входе задаётся температура жидкости.

Граничные условия на стенке (wall). Здесь может быть задана температура стенки (в русскоязычной литературе такие граничные условия

называют граничными условиями первого рода), тепловой поток от стенки (граничные условия второго рода) или коэффициент теплоотдачи (граничные условия третьего рода).

Граничные условия симметрии (symmetry). Такие условия применяются для задач, в которых существует симметрия. Расчётная область ограничивается линией (плоскостью) симметрии. Угол наклона касательной к профилю температуры (а также всех других рассчитываемых параметров) на линии (плоскости) симметрии равен нулю (см. Рисунок 3.6). Таким образом удаётся в два и более раз сократить объём рассматриваемой области, что снижает время, требующееся на расчёт.

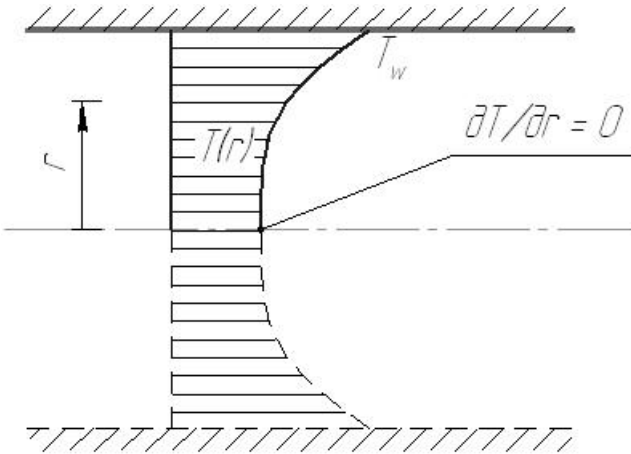


Рисунок 3.6 Течение в трубе – один из примеров симметричного течения

Периодические граничные условия (periodic boundary conditions). Эти условия сходны с граничными условиями симметрии. Их ещё иногда называют условиями повторения. Они применяются для расчётов таких течений, где существует много повторяющихся участков. Вместо того, чтобы

рассматривать всю картину течения, мы рассматриваем только один участок, что в разы экономит вычислительные затраты. Примером может послужить расчёт течения в кожухотрубном теплообменнике (линейная периодичность) или в лопаточной машине (радиальная периодичность). Пример течения с периодичностью показан на Рисунок 3.7

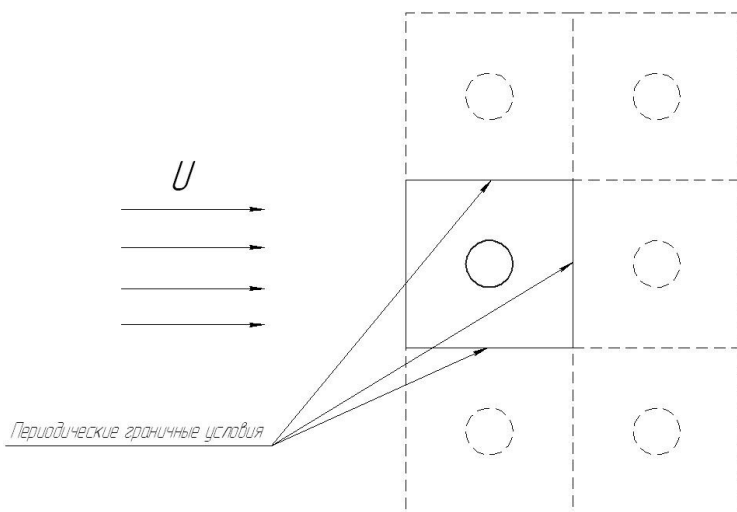


Рисунок 3.7 Течение в кожухотрубном теплообменнике. Вместо рассмотрения всего теплообменника мы рассматриваем лишь обтекание одной трубки.

Граничных условий на выходе (outlet) по температуре не задаётся.

Рассмотрим подробнее граничные условия на стенке.

Если задана температура стенки, то не возникает особенных трудностей, и нет необходимости в дополнительных уравнениях. Считается, что жидкость на поверхности стенки имеет температуру стенки.

Если задан тепловой поток, то необходимо составить для пристеночного контрольного объёма, как и для всех других, дискретный аналог уравнения энергии.

Будем считать контрольный объём около стенки половинным (см. Рисунок 3.8).

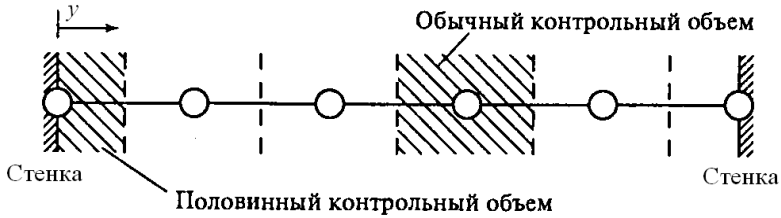


Рисунок 3.8 Обычный и половинный контрольные объёмы.

В данном случае при записи в дискретном виде уравнения энергии для пристеночного объёма изменятся только выражения для поверхностных интегралов со стороны стенки.

В уравнении (3.7) присутствует два поверхностных интеграла. Один из

них  $\left( a \int_{\text{Стенка}} \text{grad} T \cdot \mathbf{dS} \right)$  есть поток тепла за счёт теплопроводности от стенки, а

другой  $\left( \int_{\text{Стенка}} T U \cdot \mathbf{dS} \right)$  - поток тепла за счёт конвекции. Поскольку на

поверхности стенки скорость среды равна нулю, то и  $\int_{\text{Стенка}} T U \cdot \mathbf{dS} = 0$ .

Теперь, используя закон Фурье, выразим поток тепла за счёт теплопроводности. Вспомним общую формулировку закона:

$$\mathbf{q} = -\lambda \cdot \text{grad} T \quad (3.22)$$

Знак «минус» здесь означает, что поток тепла направлен в сторону уменьшения температуры, т.е. тепло перетекает из более горячей области в более холодную.

Если рассматривать только поток тепла от стенки  $q_w$ , можно получить следующее равенство:

$$q_w = -\lambda \cdot (\text{grad} T)_w = -\lambda \cdot \left( \frac{\partial T}{\partial y} \right)_w \quad (3.23)$$

Под  $y$  здесь подразумевается ось координат перпендикулярная стенке. Сопоставляя выражения для потока за счёт теплопроводности в уравнении (3.7) и формулу (3.23), получим:

$$a \int_{\text{Стенка}} \text{grad} T \cdot \mathbf{dS} = a \cdot \int_{\text{Стенка}} \left( \frac{-q_w}{\lambda} \right) \cdot \mathbf{dS} = \frac{q_w}{\rho \cdot c_p} \cdot \int_{\text{Стенка}} \mathbf{dS} = \frac{q_w}{\rho \cdot c_p} S \quad (3.24)$$

Знак «минус» здесь исчез вследствие того, что направление теплового потока (мы положили его направленным от стенки в поток) противоположно направлению нормали к поверхности пристеночного контрольного объёма. Если направление теплового потока будет направлено от потока в стенку (то есть стенка будет более холодной, нежели поток), то значение  $q_w$  нужно будет взять со знаком «минус».

Примечание: при выводе формулы (3.24) мы исходили из постоянства  $q_w$  по всей пристеночной грани контрольного объёма. Если тепловой поток от стенки не постоянен по её поверхности, а распределён по какому-либо закону, то необходимо либо вычислять интеграл от  $q_w$  по поверхности, либо считать, что для каждого контрольного объёма  $q_w = \text{const}$ . Во втором случае погрешность, вызванная таким допущением будет зависеть от закона изменения  $q_w$  и от выбранных размеров контрольных объёмов.



### 3.6 Производная по времени

Время в физике может рассматриваться как своеобразная «четвёртая координата», с той лишь разницей, что будущее и прошлое чётко разграничены между собой. Произошедшее в настоящий момент может повлиять только на будущие события, но не на прошлые (так называемый принцип причинности).

Исходя из приведённой аналогии, при численном решении задач время процесса можно разбить на некоторое количество шагов, создав наряду с пространственной сеткой временную.

Существует два основных метода решения нестационарных задач. Метод, в котором неизвестные величины на текущем временном шаге выражаются через величины предыдущего временного шага, которые уже известны, называется *явным*. В *неявном* же методе величины на текущем временном шаге выражаются друг через друга.

Явный метод более прост, однако на него накладываются дополнительные ограничения по временному шагу, в то время как никаких ограничений (кроме физических) на временной шаг в неявном методе не накладываются.

#### **Явный метод Эйлера (Euler explicit method).**

Название метода отражает тот факт, что при его использовании получаются *явные* зависимости искомой величины от величин уже известных. То есть, нам не требуется производить никаких дополнительных действий для получения решения.

Рассмотрим явный метод на примере одномерного уравнения энергии в предположении, что внутренние источники тепла отсутствуют ( $q_V = 0$ ):

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = -U_x \frac{\partial T}{\partial x} + a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (3.25)$$

Введём равномерную сетку с шагом  $\delta x$  и зададимся шагом по времени  $\Delta \tau$ . Используя схему с линейной интерполяцией, получим (верхним индексом будем отмечать шаги по времени, нижним - номера ячеек сетки):

$$T_i^n = T_i^{n-1} + \left( -U_x \frac{T_{i+1}^{n-1} - T_{i-1}^{n-1}}{2\delta x} + a \cdot \frac{T_{i-1}^{n-1} - 2T_i^{n-1} + T_{i+1}^{n-1}}{(\delta x)^2} \right) \Delta \tau \quad (3.26)$$

После алгебраических преобразований получим:

$$T_i^n = (1 - 2Fo)T_i^{n-1} + \left( Fo - \frac{Co}{2} \right) T_{i+1}^{n-1} + \left( Fo + \frac{Co}{2} \right) T_{i-1}^{n-1} \quad (3.27)$$

Здесь  $Fo = \frac{a \cdot \Delta \tau}{(\delta x)^2}$  - сеточное число Фурье (cell Fourier number),

$Co = \frac{U_x \Delta \tau}{\delta x}$  - сеточное число Куранта (cell Courant number). Эти два

безразмерных параметра являются одними из наиболее важных при решении нестационарных задач гидродинамики и теплообмена.

Физически число Фурье представляет собой отношение временного шага  $\Delta \tau$  к времени, за которое тепловая волна распространится на расстояние  $\delta x$ .

Число же Куранта есть отношение временного шага  $\Delta \tau$  к характерному времени конвекции  $\delta x / U_x$ .

Таким образом, эти числа отражают, насколько велик шаг времени по отношению к характерному времени протекания процессов в системе. Если мы выберем слишком большой временной шаг, то, очевидно мы просто «пропустим» (т.е. не будем учитывать) какие-то процессы в системе. Это может привести к нефизичности решения.

Пределы значений для  $Fo$  и  $Co$  могут быть получены в общем виде, однако мы здесь приводить эти выкладки не будем, а ограничимся

следующими простыми рассуждениями. Как видно из (3.27), температура на временном шаге  $n$  в точке  $i$  зависит от температур на предыдущем временном шаге в точках  $i-1$ ,  $i$ ,  $i+1$ . Если коэффициенты перед этими температурами будут иметь произвольный знак, то это будет означать, что рост температуры в точках  $i$  и  $i+1$  на предыдущем временном шаге может привести к падению температуры в точке  $i$  на текущем временном шаге, что противоречит принципам термодинамики.

Таким образом, мы пришли к искомым ограничениям по значению чисел  $Fo$  и  $Co$  для явной схемы при использовании схемы с линейной интерполяцией:

$$\begin{cases} Fo < \frac{1}{2} \\ Co < 2Fo \end{cases} \quad (3.28)$$

Решая систему этих неравенств, получим:

$$\begin{cases} \Delta \tau < \frac{(\delta x)^2}{2a} \\ \delta x < \frac{2a}{U_x} \end{cases} \quad (3.29)$$

То есть мы получили, что для случая конвективного теплообмена должен быть ограничен не только шаг по времени, но и шаг пространственной сетки. В случае, если конвекция отсутствует ( $U_x = 0$ ), ограничение на шаг сетки снимается (из второго неравенства в (3.29) получим, что  $\delta x < \infty$ , что выполняется всегда). Разумеется, это не означает, что ограничения на шаг сетки не существует вовсе, однако они определяются другими параметрами.

Если преобразовать второе неравенство в (3.29), можно получить безразмерный параметр, называемый числом сеточным числом Пекле  $Pe = \frac{U_x \cdot \delta x}{a}$ . Таким образом, для задач конвективного теплообмена при

использовании явного метода и схемы с линейной интерполяцией должно выполняться условие  $Pe < 2$ .

При использовании других схем дискретизации (метода «против потока», методы с квадратичной интерполяцией и т.д.) условия, налагаемые на шаги по времени и по пространственной сетке должны так же исходить из положительности коэффициентов при температурах в различных точках.

### **Неявный метод Эйлера (Euler implicit method).**

В неявной схеме искомая величина выражается через величины на том же временном шаге. Для схемы с линейной интерполяцией получим:

$$T_i^n = T_i^{n-1} + \left( -U_x \frac{T_{i+1}^n - T_{i-1}^n}{2\delta x} + a \cdot \frac{T_{i-1}^n - 2T_i^n + T_{i+1}^n}{(\delta x)^2} \right) \Delta \tau \quad (3.30)$$

После преобразований, получим:

$$(1 + 2Fo)T_i^n + \left( \frac{Co}{2} - Fo \right) T_{i+1}^n + \left( -\frac{Co}{2} - Fo \right) T_{i-1}^n = T_i^{n-1} \quad (3.31)$$

Как уже было упомянуто выше, данный метод не налагает ограничений на временной шаг (ограничения на временной шаг налагаются чисто физические – если временной шаг будет больше характерного времени протекания какого-либо процесса, то мы его попросту «пропустим!»). Однако он требует больших вычислительных затрат. Эти затраты особенно ощутимы в задачах с большим количеством ячеек в сетках. К примеру, стандартные задачи на внешнее обтекание могут потребовать расчётных сеток с несколькими *миллионами* ячеек. Это означает, что при использовании неявного метода потребуется решить систему из нескольких *миллионов* уравнений! Даже при нынешнем уровне развития вычислительной техники это потребует значительного времени.

Существуют и другие методы получения дискретных аналогов производной по времени. Мы не будем приводить их здесь. Интересующиеся могут найти их в [4, 5, 8].

### **Метод установления**

Этот метод часто применяется для решения стационарных задач. Он заключается в том, что стационарное решение получается из решения нестационарной задачи. Считается, что система, у которой существует стационарное состояние, стремится прийти в него. Таким образом, если мы будем решать нестационарную задачу на достаточно большом промежутке времени, то, в конце концов, получим стационарное решение. Начальные же условия задачи при этом могут быть практически любыми.

Метод установления хорош в первую очередь тем, что позволяет проверить, есть ли у системы стационарное состояние как таковое. Также его часто используют в пакетах прикладных программ, поскольку иначе пришлось бы составлять отдельные модули для решения стационарных и нестационарных задач, а метод установления позволяет использовать один модуль для решения задач обоих типов.

Обычно для решения задач методом установления применяют неявные схемы. Они позволяют задать достаточно большие шаги по времени, что приводит к более быстрому получению искомого стационарного решения.

## **3.7 Общий алгоритм решения задачи**

Мы рассмотрели здесь основные вопросы, связанные с решением задач вычислительной теплопередачи с помощью метода конечных объёмов. Теперь сведём всё в единую картину.

В общем и целом составление системы приближенных алгебраических уравнений из исходных уравнений в частных производных представляет

сборку из отдельных готовых «деталей». Надо лишь выбрать, какие «детали» лучше подойдут для данной конкретной задачи, и учесть требования, которые при этом предъявляются.

Приведём общий алгоритм, которому надо следовать при составлении численной схемы:

*Постановка задачи.* Начинать следует с выбора тех уравнений, которые мы будем решать. Что нам нужно найти и что нам известно при этом? Необходимо также определиться с точной геометрией расчётной области, типом задачи (стационарная или нестационарная), граничными и начальными условиями.

*Выбор численной схемы.* Сюда входит выбор схемы аппроксимации («против потока», схемы с интерполяцией и т.п.), выбор метода получения дискретного аналога производной по времени (если задача нестационарная или выбран метод установления решения стационарной задачи).

*Построение сетки и выбор шагов по времени.* После выбора схемы следует учесть все ограничения, которые накладываются ею на размер шага сетки и временного шага. Следует определиться, будет ли сетка равномерной или нет. Если сетка равномерна, то следует выбрать шаг. Если неравномерна, то следует собрать в единый массив координаты всех расчётных узлов.

*Построение численной схемы.* Ячейки сетки разделяются на группы (ячейки внутри расчётной области и ячейки на различных границах области). Для каждой группы ячеек записываются проинтегрированные по контрольному объёму (т.е. вида (3.7)) уравнения. В соответствии с выбранной схемой аппроксимации следует расписать все члены, входящие в уравнение. При рассмотрении поверхностных интегралов особое внимание следует обращать на знак (подробнее см. п. 3.3).

Решение полученной системы уравнений.

Проверка адекватности полученного решения.

## 4 Расчёт поля течения

В разделе 3 мы рассмотрели общие принципы метода конечных объёмов. При этом мы считали, что поле скоростей нам известно. Однако на практике такое встречается редко. Чаще всего поле скоростей заранее неизвестно и его требуется найти.

В данном разделе мы рассмотрим вопросы, касающиеся решения полной системы уравнений Навье-Стокса. Пока будем считать, что течение у нас ламинарное. Вопросы, связанные с турбулентностью будут рассмотрены позднее.

### 4.1 Интегрирование по контрольному объёму уравнения движения,

Мы уже рассматривали интегрирование по контрольному объёму уравнений неразрывности и энергии. Теперь настала очередь уравнения движения:

$$\int_V \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \tau} dV + \int_V (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} dV = \int_V \mathbf{J} dV - \frac{1}{\rho} \int_V \nabla P dV + \nu \int_V \Delta \mathbf{U} dV \quad (4.1)$$

Воспользовавшись формулой (1.14), преобразуем интеграл от градиента давления. Будем иметь:

$$\int_V \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \tau} dV + \int_V (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} dV = \int_V \mathbf{J} dV - \frac{1}{\rho} \int_S P d\mathbf{S} + \nu \int_V \Delta \mathbf{U} dV \quad (4.2)$$

Данное уравнение – векторное. Его можно свести к трём обычным (скалярным) уравнениям, спроецировав на оси координат. Запишем лишь одну такую проекцию:

$$\int_V \frac{\partial U_X}{\partial \tau} dV + \int_V \operatorname{div}(U_X \mathbf{U}) dV = \int_V J_X dV - \frac{1}{\rho} \int_S P dS_X + \nu \int_V \Delta U_X dV \quad (4.3)$$

Отсюда сразу видно, что мы можем преобразовать некоторые интегралы по объёму к поверхностным. Применяв теорему Остроградского-Гаусса, получим:

$$\int_V \frac{\partial U_X}{\partial \tau} dV + \oint_S U_X \mathbf{U} \cdot d\mathbf{S} = \int_V J_X dV - \frac{1}{\rho} \int_S P dS_X + \nu \oint_S \operatorname{grad} U_X \cdot d\mathbf{S} \quad (4.4)$$

Чтобы получить второе и третье уравнение, надо  $x$  заменить соответственно на  $y$  и  $z$ .

В тензорной нотации то же самое запишется в виде:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \int_V U_i dV + \int_S U_j U_i \cdot dS_j = \int_V J_i dV - \frac{1}{\rho} \int_S P dS_i + \nu \int_S \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \cdot dS_j \quad (4.5)$$

Если бы мы сразу воспользовались тензорной нотацией, то нам бы не пришлось записывать проекцию уравнения, а мы бы сразу получили окончательный результат.

Обычно в литературе тензорная нотация применяется совместно с обычной.

## 4.2 Расчёт поля давления

Когда мы рассматриваем течение сжимаемой жидкости, то уравнение неразрывности имеет вид (3.1). В это уравнение входит плотность жидкости  $\rho$ . Зная уравнение состояния, можно легко найти поле давления из поля плотности. Чаще всего уравнением состояния является уравнение Менделеева-Клапейрона:

$$p = \rho RT \quad (4.6)$$

В системе же уравнений течения несжимаемой жидкости (2.1)-(2.3) давление присутствует только в виде своего градиента в уравнении (2.2), из



которого мы будем находить составляющие скорости. При этом уравнения для явного определения поля давления нет и способ нахождения давления далеко не очевиден.

К данной проблеме существует несколько подходов.

- Исключение давления из системы уравнений.
- Получения уравнения типа уравнения Пуассона для давления.

### Методы исключения давления из системы уравнений

Вспомним известную формулу векторного анализа (1.11) и запишем её для вектора скорости:

$$(\mathbf{U} \cdot \nabla)\mathbf{U} = \text{grad} \left( \frac{U^2}{2} \right) + \text{rot } \mathbf{U} \times \mathbf{U} \quad (4.7)$$

Подставив (4.7) в (2.2) и применив операцию *rot*, получим *уравнение для вихря*:

$$\frac{\partial \text{rot } \mathbf{U}}{\partial \tau} - \text{rot}(\mathbf{U} \times \text{rot } \mathbf{U}) = \nu \cdot \Delta(\text{rot } \mathbf{U}) + \text{rot } \mathbf{J} \quad (4.8)$$

Это уравнение вместе с уравнением (2.1) составляют систему для нахождения вектора скорости. Их можно решить, используя метод конечных объёмов и применяя известные соотношения векторного анализа (см. п. 1.1).

К недостаткам этого подхода можно отнести некоторую сложность в понимании физического полученных уравнений (что, впрочем, субъективно).

Кроме того, можно модифицировать этот подход введением функции тока. Этот приём широко используется для описания двумерных течений.

Функцию тока  $\psi$  определяют следующим образом:

$$U_x = \frac{\partial \psi}{\partial y}; \quad U_y = -\frac{\partial \psi}{\partial x} \quad (4.9)$$

Очевидно, что при таком рассмотрении уравнение неразрывности удовлетворяется автоматически (проверьте это, подставив (4.9) в (2.1)).

Для ротора скорости в двумерном случае мы имеем следующее выражение:

$$\text{rot } \mathbf{U} = \omega = \frac{\partial U_y}{\partial x} - \frac{\partial U_x}{\partial y} \quad (4.10)$$

Принимая во внимание формулу (4.9), можно показать, что:

$$\omega = -\Delta \psi \quad (4.11)$$

Окончательно получим следующую форму уравнения движения:

$$\frac{\partial \omega}{\partial \tau} + \left( \frac{\partial \omega}{\partial x} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial y} - \frac{\partial \omega}{\partial y} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = \nu \cdot \Delta \omega + \text{rot } \mathbf{J} \quad (4.12)$$

Преимуществом введения переменных «функция тока - вихрь» является то, что вместо трёх уравнений (уравнение неразрывности и две проекции векторного уравнения движения), мы решаем два – уравнение (4.11) и (4.12). Если подставить (4.11) в (4.12), то можно вообще свести задачу к одному уравнению четвертого порядка. После получения решения для введённых переменных с помощью них вычисляются так называемые естественные переменные (скорость, давление и т.п.).

Серьёзным недостатком этого подхода является неочевидность граничных условий. Он более интересен со своей математической стороны, однако несёт мало физического смысла. Поэтому метод конечных объёмов в данном случае применить тоже несколько затруднительно. Опять же, восстановление значений естественных переменных по полю значений функции тока и вихря – тоже не совсем простая задача.

Желающих подробнее рассмотреть методы решения задач с помощью введения переменных «функция тока – вихрь» мы отсылаем к [9] и больше останавливаться на них не будем.

### Уравнение Пуассона для давления

Используя уравнения неразрывности и движения, можно получить уравнение, из которого можно явным образом найти поле давления.

Для этого применим к обеим частям уравнения (2.2) операцию дивергенции:

$$\operatorname{div}(\operatorname{grad} P) = \rho \cdot \operatorname{div} \left( \mathbf{J} - \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \tau} - (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} + \nu \Delta \mathbf{U} \right) \quad (4.13)$$

Произведём некоторые преобразования, учитывая формулы (1.11), а также тот факт, что:

$$\operatorname{div} \left( \frac{\partial \phi}{\partial \tau} \right) = \frac{\partial}{\partial \tau} (\operatorname{div} \phi) \quad (4.14)$$

Получим следующее выражение:

$$\Delta P = \rho \left( \operatorname{div} \mathbf{J} - \frac{\partial}{\partial \tau} (\operatorname{div} \mathbf{U}) - \operatorname{div} [(\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U}] + \nu \operatorname{div} (\Delta \mathbf{U}) \right) \quad (4.15)$$

Примем во внимание тот факт, что по формуле (1.10)  $\Delta \mathbf{U} = \operatorname{grad}(\operatorname{div} \mathbf{U}) - \operatorname{rot}(\operatorname{rot} \mathbf{U})$ . Но дивергенция скорости согласно уравнению неразрывности (2.1) равна нулю. Дивергенция любого ротора так же равна нулю (см. формулы (1.11)). Таким образом, мы приходим к следующему уравнению:

$$\Delta P = \rho \{ \operatorname{div} \mathbf{J} - \operatorname{div} [(\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U}] \} \quad (4.16)$$

Это и есть искомое уравнение для давления. Из него в частности видно, что для несжимаемой жидкости поле давления от вязкости не зависит.

Запишем его так же и в тензорной нотации:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\partial P}{\partial x_i} \right) = \rho \left[ \frac{\partial J_i}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\partial U_i U_j}{\partial x_i} \right) \right] \quad (4.17)$$

Таким образом, система уравнений, описывающих неизотермическое течение несжимаемой жидкости состоит из уравнений (4.16), (2.2) и (2.3), причём уравнение (4.16) заменило здесь уравнение неразрывности (2.1).

Проинтегрируем уравнение (4.16) по контрольному объёму:

$$\oint_S \text{grad } P \cdot \mathbf{dS} = \rho \left[ \oint_S \mathbf{J} \cdot \mathbf{dS} - \oint_S (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} \cdot \mathbf{dS} \right] \quad (4.18)$$

Тут следует сделать важное замечание: для получения корректных результатов способ, которым получают дискретные аналоги интегралов в уравнении (4.18) и (4.5) должен быть одним и тем же. Проще говоря, если для интеграла по градиенту давления в (4.18) выбран способ с линейной интерполяцией, то и в уравнении (4.5) интеграл от давления должен быть аппроксимирован с помощью линейной интерполяции (но никак не с помощью квадратичной или кубической или какого-либо другого метода).

Всё это обуславливается тем, что мы получили уравнение для давления путём преобразования уравнения движения и применения уравнения неразрывности. Таким образом, напрямую уравнения неразрывности мы не решаем, оно соблюдается автоматически. Однако если при численном решении уравнений мы будем применять для каждого из них неодинаковые способы, то уравнение неразрывности соблюдаться не будет.

### 4.3 Подходы и проблемы

Как мы уже показали выше, решение каждого из уравнений системы (2.1)-(2.3), или (4.16), (2.2) и (2.3) сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений. И уравнений этих столько, сколько ячеек в расчётной сетке.

Каждую из систем этих уравнений можно решать как совместно со всеми другими, так и по отдельности. Когда мы решаем уравнения по отдельности (т.н. раздельный подход, *segregated approach*), мы рассматриваем только какое-то одно уравнение системы (2.1)-(2.3). Так мы поступали в п. 3, считая, что поле скорости нам известно. Этим мы *лианеризовали* уравнение энергии. Проще говоря, свели нелинейное уравнение к линейному.

Раздельное решение требует меньше памяти, хотя при этом может возникнуть ряд проблем.

Во-первых, при раздельном решении требуется применять особые приёмы для того, чтобы решения, получаемые для поля давления и для поля скорости, соответствовали друг другу (в англоязычной терминологии это называется термином *pressure-velocity coupling*, т.е. – «стыковка скорости и давления»). Для этой «стыковки» часто вводят для каждого уравнения системы свою собственную особую сетку (хотя есть подходы, где для всех уравнений используется одна сетка) и специальные формулы для корректировки давления и скорости. Два популярных метода сокращённо называются SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*) и SIMPLER (*SIMPLE Revised*). Подробно эти методы описаны в [5].

При совместном решении (*coupled approach*) все уравнения решаются совместно. Это усложняет задачу, поскольку все уравнения в системе (2.1)-(2.3), кроме уравнения (2.1) теперь нелинейны. Для их решения требуется больше ресурсов, однако при использовании этого подхода часто удаётся добиться более быстрой сходимости решения, чем при раздельном решении.

## **5 Турбулентность: проблемы моделирования и подходы к их решению**

До этого мы не касались вопроса режима течения. Мы лишь упомянули, что уравнения, представленные в п. 4 в такой форме могут быть успешно применены в основном лишь для ламинарных потоков. Данная глава посвящена проблеме турбулентности и основным подходам к её моделированию.

Все дифференциальные уравнения здесь записываются только в тензорной нотации, поэтому читателю рекомендуется просмотреть п. 1.2.

### **5.1 Феномен турбулентности**

Начать рассмотрение феномена турбулентности проще всего именно с того самого исторического примера, который и положил начало учению о ней. Речь идёт об опыте О. Рейнольдса 1883 года.

Экспериментальная установка показана на рисунках Рисунок 5.1 и Рисунок 5.2. Она состоит из резервуара А с водой, от которого отходит стеклянная труба В с краном С на конце, и сосуда D с водным раствором краски, которая может по трубке вводиться тонкой струйкой внутрь стеклянной трубы В.

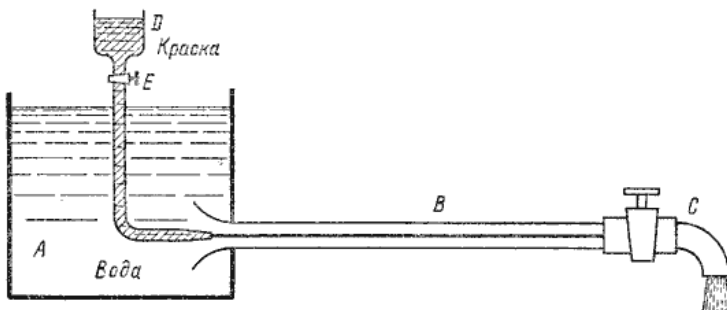


Рисунок 5.1 Опыт Рейнольдса; ламинарный режим течения

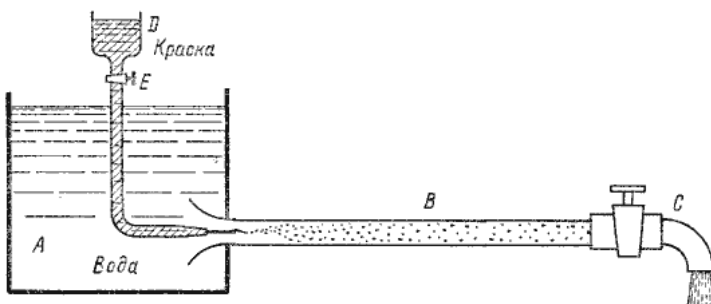


Рисунок 5.2 Опыт Рейнольдса; турбулентный режим течения

*Первый случай движения жидкости.* Если немного приоткрыть кран С и дать возможность воде протекать в трубе с небольшой скоростью, а затем с помощью крана Е впустить краску в поток воды, то увидим, что введенная в трубу краска не будет перемешиваться с потоком воды. Струйка краски будет отчетливо видимой вдоль всей стеклянной трубы, что указывает на слоистый характер течения жидкости и на отсутствие перемешивания. Такой режим движения называется *ламинарный* (Рисунок 5.1).

*Второй случай движения жидкости.* При постепенном увеличении скорости течения воды в трубе путем открытия крана С картина течения вначале не меняется, но затем при определенной скорости течения наступает быстрое ее изменение. Струйка краски по выходе из трубки начинает колебаться, затем размывается и перемешивается с потоком воды, причем становятся заметными вихреобразования и вращательное движение жидкости. Такое течение называется *турбулентным* (Рисунок 5.2).

Если бы мы измеряли скорость в каком-либо сечении трубки в первом и втором случае, то увидели бы, что в первом случае она оставалась бы величиной постоянной, а во втором – совершала бы нерегулярные колебания около некоторого среднего значения.

Рейнольдс обнаружил, что переход течения от ламинарного режима к турбулентному наблюдается при некотором значении скорости, которую принято называть критической. Значение критической скорости зависит от соотношения диаметра трубки, плотности среды и вязкости.

Обобщая данные опытов, Рейнольдс ввёл безразмерный критерий, названный впоследствии в его честь:

$$Re = \frac{\rho U d}{\mu} \quad (5.1)$$

Физический смысл критерия Рейнольдса заключается в том, что он представляет собой соотношение сил инерции и сил вязкости. Если силы инерции превышают на какой-то порядок (определяемый критическим числом Рейнольдса) силы вязкости, течение переходит к турбулентному режиму.

Опыт показал, что критическое число Рейнольдса для течения в круглой трубе  $Re_{кр}$  примерно равно 2300.

Таким образом, критерий подобия Рейнольдса позволяет судить о режиме течения жидкости в трубе. При  $Re < Re_{кр}$  течение является



ламинарным, а при  $Re > Re_{кр}$  течение является турбулентным. Точнее говоря, вполне развитое турбулентное течение в трубах устанавливается лишь при  $Re$  примерно равному 4000, а при  $Re = 2300 \dots 4000$  имеет место переходная область.

Так в чём же феномен турбулентности? Почему после того, как силы инерции во сколько-то раз превышают силы вязкости, в потоке начинают образовываться вихри, а все параметры колеблются?

Всё дело в том, что когда силы вязкости малы по отношению к силам инерции, течение *теряет устойчивость*. Ведь на самом деле случайные и хаотические процессы происходят в жидкости постоянно, даже в условиях, когда она никуда не движется или течёт в ламинарном режиме (вспомните, что такое броуновское движение). Однако когда силы вязкости достаточно высоки, любые флуктуации очень быстро угасают. Вязкость не даёт им развиваться. Напротив, когда вязкость мала, любое случайное возмущение не угасает, а наоборот может даже усиливаться. Так происходит вихреобразование, так течение становится турбулентным.

## 5.2 Явления отрыва

Турбулентность может возникнуть также в случае внешнего обтекания тел. Рассмотрим, например, обтекание цилиндра.

При  $Re < 5$  поток обтекает цилиндр в ламинарном режиме, полностью огибая его (см. Рисунок 5.3).



Рисунок 5.3 Обтекание цилиндра. Безотрывный режим.  $Re=1.54$

Начиная с  $Re \approx 5$ , за цилиндром происходит отрыв течения и формируются вихри. По мере увеличения числа  $Re$  они вытягиваются (Рисунок 5.4 и Рисунок 5.5). При числе  $Re$  порядка 100 вихри начинают отрываться и двигаться вниз по потоку, образуется так называемая *дорожка Кармана* (Рисунок 5.6).

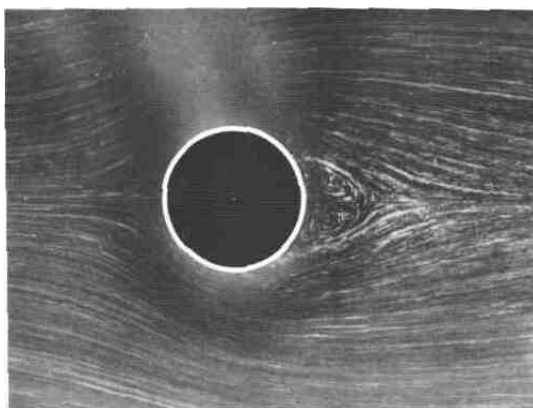


Рисунок 5.4 Отрывное обтекание цилиндра,  $Re=13.1$



Рисунок 5.5 Отрывное обтекание цилиндра,  $Re=26$

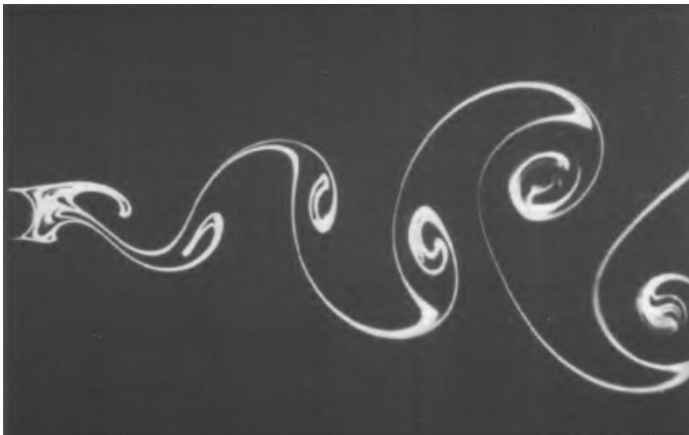


Рисунок 5.6 Дорожка Кармана при обтекании цилиндра.  $Re=140$

Цилиндр – гладкое тело, однако уже при малых числах Рейнольдса обтекающий их поток отрывается, и образуются вихри. А что будет, если мы

рассмотрим какое-нибудь более плохообтекаемое тело, например квадратный выступ на стенке? Очевидно, что отрыв на нём будет происходить даже при очень малых числах  $Re$ . Это используется в технике, когда нужно специально турбулизовать поток.

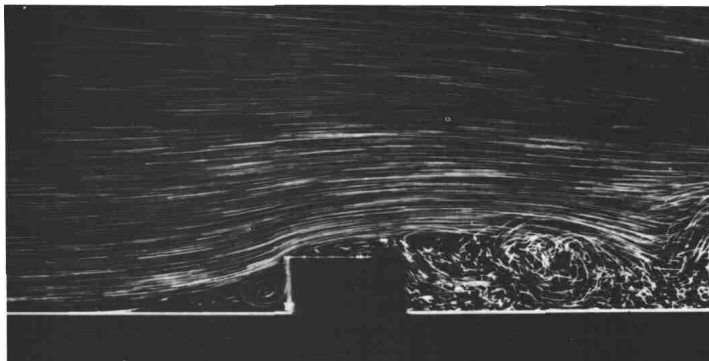


Рисунок 5.7 Обтекание прямоугольного выступа на пластине

### 5.3 Осреднённое движение. Уравнения Рейнольдса.

Как же можно описать турбулентное движение? Вообще, по большому счёту, никаких новых уравнений не нужно. Турбулентное течение вполне может быть описано обычной системой уравнений Навье-Стокса, поскольку при их выводе не налагалось никаких ограничений на соотношение между силами инерции и силами вязкости. Однако, если мы каким-то обычным способом попытаемся численно решить эти уравнения для турбулентного режима течения (этот подход называется прямым численным моделированием, Direct Numerical Simulation, DNS), то у нас, скорее всего ничего не получится. Для решения уравнений Навье-Стокса в случае турбулентного режима нужны очень качественные сетки с очень малым

шагом. Шаг по времени так же должен быть очень мал. Всё это потребует очень мощных вычислительных машин с большим объёмом памяти. И потребность в вычислительных ресурсах растёт примерно пропорционально кубу из числа Рейнольдса в рассматриваемом течении (подробнее о DNS см. [10, 11]). Таким образом, в инженерных и научных расчётах, часто возникает необходимость как-то упростить систему уравнений Навье-Стокса, снизив тем самым потребности в вычислительных мощностях.

Для количественного описания развитого турбулентного движения Рейнольдс предложил следующий, получивший широкое применение приём. Регистрируя во времени параметры потока можно предположить, что значение каждого из них можно представить в виде суммы *осреднённой* (обозначается чертой сверху) и *пульсационной* (обозначается штрихом) составляющих (см. Рисунок 5.8). Например, возьмём скорость:

$$U_x = \overline{U_x} + U'_x; \quad U_y = \overline{U_y} + U'_y; \quad U_z = \overline{U_z} + U'_z; \quad (5.2)$$

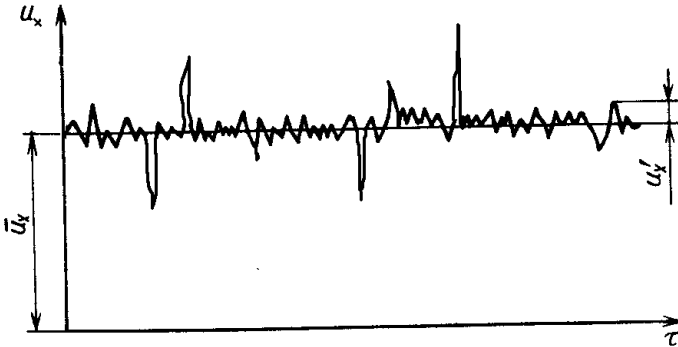


Рисунок 5.8 Пульсации осевой скорости

То есть мы будем рассматриваем её как некую не меняющуюся (или меняющуюся по какому-то определённом закону) величину к которой добавлены *случайные* пульсации. Таким образом, мы рассматриваем турбулентное течение, как некий *случайный процесс*, применяя к нему приёмы, используемые в теории вероятностей и математической статистике.

Указанное выше осреднение имеет следующие свойства:

$$\overline{\overline{\phi}} = \overline{\phi} \quad (5.3)$$

$$\overline{\phi + \psi} = \overline{\phi} + \overline{\psi} \quad (5.4)$$

$$\overline{const \cdot \phi} = const \cdot \overline{\phi} \quad (5.5)$$

$$\overline{\overline{\phi \cdot \psi}} = \overline{\phi} \cdot \overline{\psi} \quad (5.6)$$

$$\overline{\phi'} = \overline{\phi} - \overline{\overline{\phi}} = 0 \quad (5.7)$$

$$\left( \overline{\frac{\partial \phi}{\partial x}} \right) = \frac{\partial \overline{\phi}}{\partial x} \quad (5.8)$$

Представив в виде (5.2) скорость и температуру, подставив их в уравнения системы (2.1)-(2.3) и выполнив некоторые преобразования, получим уравнения Рейнольдса (RANS – Reynolds Averaged Navier-Stokes):

$$\frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (5.9)$$

$$\rho \left[ \frac{\partial \overline{U}_i}{\partial \tau} + \frac{\partial (\overline{U}_i \cdot \overline{U}_j)}{\partial x_j} \right] = - \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} - \rho \overline{U'_j U'_i} \right] + \rho J_i \quad (5.10)$$

$$\rho c_p \left[ \frac{\partial \overline{T}}{\partial \tau} + \overline{U}_j \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j} \right] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \lambda \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j} - \rho c_p \overline{U'_j T'} \right] + q_v \quad (5.11)$$

Данная система уравнений содержит девять неизвестных членов (шесть членов вида  $-\rho \cdot \overline{U_i U_j}$  и три члена вида  $-\rho c_p \overline{U'_j T'}$ ).

Если посмотреть на структуру уравнений, то становится понятен физический смысл этих величин. Член  $-\rho \cdot \overline{U_i U_j}$  представляет собой тензор турбулентных напряжений трения или тензор рейнольдсовских напряжений (Reynolds stress tensor). В самом деле, если расписать его, мы получим девять величин:

$$\Pi_{ij} = -\rho \begin{pmatrix} \overline{U_x^2} & \overline{U'_x U'_y} & \overline{U'_x U'_z} \\ \overline{U'_y U'_x} & \overline{U_y^2} & \overline{U'_y U'_z} \\ \overline{U'_z U'_x} & \overline{U'_z U'_y} & \overline{U_z^2} \end{pmatrix} \quad (5.12)$$

Следует заметить, что на самом деле эти дополнительные напряжения (равно как и дополнительный тепловой поток) появились только потому, что мы представили скорость (и температуру) в виде (5.2). Чисто физически, кроме сил трения, обусловленных молекулярной вязкостью, других сил трения в потоке нет.

Напряжений в этом тензоре (5.12) девять, однако, очевидно, что  $\overline{U_i U_j} = \overline{U_j U_i}$ , поэтому неизвестных величин только шесть.

Член  $-\rho c_p \overline{U'_j T'}$  представляет собой дополнительный поток тепла за счёт турбулентного переноса.

Чтобы вычислить эти члены, требуются дополнительные уравнения. Эти уравнения обычно называют моделью турбулентности.

Выбор модели турбулентности для конкретной задачи – вопрос непростой. При нём нужно учитывать свойства каждой модели и имеющиеся в распоряжении вычислительные мощности.

В последующих параграфах мы изложим самые простые концепции и подходы к моделированию турбулентности и приведём иерархию существующих на сегодняшний день моделей.

## 5.4 Гипотеза Буссинеска

Сама по себе гипотеза Буссинеска (Boussinesq) не является моделью турбулентности. Она лишь утверждает, что турбулентные напряжения, как и обычные напряжения трения пропорциональны градиенту скорости. Если в случае обычных напряжений трения коэффициент пропорциональности был коэффициент динамической вязкости  $\mu$  (dynamic viscosity), то в случае напряжений Рейнольдса это коэффициент *турбулентной вязкости*  $\mu_T$  (eddy viscosity). То есть влияние турбулентности на течение учитывается с помощью дополнительной вязкости, возникающей в потоке.

В случае течений, когда две проекции скорости малы по сравнению с третьей (например, течение в трубе или течение в пограничном слое) гипотеза Буссинеска записывается очень просто ( $\sigma$  в данном случае – полное напряжение трения; а  $\mu_{eff}$  – т.н. эффективная вязкость):

$$\sigma = \mu_{eff} \frac{\partial \overline{U}_x}{\partial y} = (\mu + \mu_T) \frac{\partial \overline{U}_x}{\partial y} \quad (5.13)$$

Для общего случая течения несжимаемой жидкости гипотеза Буссинеска записывается следующим образом:

$$-\rho \overline{U_i U_j} = \mu_T \cdot \left( \frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \rho k \quad (5.14)$$

В данном уравнении  $\delta_{ij}$  - символ Кронекера (см. (1.22)), а  $k = \frac{\overline{U'_i U'_i}}{2}$  - кинетическая энергия турбулентности.

Подставив (5.14) в (5.10), после преобразований получим:

$$\rho \left[ \frac{\partial \overline{U}_i}{\partial \tau} + \frac{\partial (\overline{U}_i \cdot \overline{U}_j)}{\partial x_j} \right] = - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ (\mu + \mu_T) \frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} \right] + \rho J_i \quad (5.15)$$



Здесь  $P = \left( \frac{-}{p} + \frac{2}{3} \rho k \right)$  - давление с учётом турбулентных пульсаций.

Гипотезу Буссинеска можно применить и к уравнению энергии. В этом случае она будет выглядеть следующим образом:

$$-\rho c_p \overline{U'_j T'} = \lambda_T \cdot \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} \quad (5.16)$$

То есть дополнительный турбулентный тепловой поток выражается через дополнительную турбулентную теплопроводность среды. В этом случае уравнение (5.11) примет вид:

$$\rho c_p \left[ \frac{\partial \bar{T}}{\partial \tau} + \overline{U_j} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} \right] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ (\lambda + \lambda_T) \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} \right] + q_v \quad (5.17)$$

По аналогии с обычным числом Прандтля (которое устанавливает связь между молекулярными коэффициентами вязкости и теплопроводности), можно ввести турбулентное число Прандтля, устанавливающее связь между соответствующими турбулентными коэффициентами:

$$Pr_T = \frac{\mu_T c_p}{\lambda_T} \quad (5.18)$$

Для многих течений жидкостей и газов (например – течения в трубах, течения в соплах, струи) предполагают, что  $Pr_T = 0.9$ . При заданном турбулентном числе Прандтля необходимо найти только один из коэффициентов, а второй тогда получается автоматически. Обычно ищут турбулентную вязкость, а турбулентную теплопроводность вычисляют через  $Pr_T$ .

Подходы, использующие гипотезу Буссинеска, имеют один существенный недостаток. Коэффициент турбулентной вязкости есть скаляр.

Таким образом, предполагается, что турбулентность *изотропна*, т.е. не зависит от направления, что верно далеко не всегда.

## 5.5 Путь смешения Л.Прандтля. Алгебраические модели

Модель для описания распределения турбулентной кинематической вязкости  $\nu_T = \frac{\mu_T}{\rho}$  впервые была предложена Л.Прандтлем в 1925г. и известна как модель пути смешения.

Рассматривая осредненные сдвиговые течения без градиента давления, Прандтль постулировал, что характерный масштаб пульсаций скорости равен градиенту осредненной скорости, умноженному на характерный масштаб длины  $l_m$ , который он назвал путем смешения.

Понятие пути смешения в теории турбулентности сходно понятию свободного пробега молекулы в кинетической теории газов. Путь смешения есть некоторая длина, на которой вихрь теряет свою индивидуальность, смешиваясь с окружающим потоком. Это расстояние также равно среднему расстоянию пульсаций.

В свете гипотезы пути смешения можно получить следующее выражение для турбулентной вязкости:

$$\nu_T = l_m^2 \cdot \left| \frac{\partial \overline{U_x}}{\partial y} \right| \quad (5.19)$$

Длина пути смешения определяется эмпирически. Успех предложенной Прандтлем модели был предопределен тем обстоятельством, что для многих простых типов течений со сдвигом  $l_m$  может быть выражена относительно

несложными формулами. При рассмотрении течения в пограничном слое полагают

$$l_m = \kappa y \quad (5.20)$$

Здесь  $\kappa = 0.4$  – постоянная Кармана.

С помощью модели Прандтля было получено много важнейших для теплообмена и гидродинамики результатов. Однако сейчас она мало применяется, поскольку пригодна лишь для простых типов течений (отрывные течения, скажем, она описывает плохо).

Модель пути смешения Прандтля является представителем семейства *алгебраических* моделей. Алгебраические модели отличаются тем, что для получения значения турбулентной вязкости не требуется решать дополнительных дифференциальных уравнений. Моделей этой группы для разных случаев создано достаточно много. Хороший их обзор дан в [10].

## 5.6 Модель $k$ - $\varepsilon$ . Дифференциальные модели

Модели с дифференциальными уравнениями являются более сложными, однако они и более универсальны, их можно применять к широкому кругу задач.

Самой известной и популярной на сегодняшний день дифференциальной моделью является модель  $k$ - $\varepsilon$ . Для её построения вводятся два параметра:

$$k = \frac{\overline{U'_i U'_i}}{2} \quad - \text{кинетическая энергия турбулентности} \quad \text{и} \quad \varepsilon = \nu \frac{\partial U'_i}{\partial x_k} \frac{\partial U'_i}{\partial x_k} \quad -$$

диссипация турбулентной энергии. Фактически уравнения модели турбулентности представляют собой закон сохранения турбулентной энергии. Из анализа размерностей  $k$  и  $\varepsilon$  следует, что турбулентная кинематическая вязкость должна выражаться как:

$$v_T = c_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (5.21)$$

где  $c_\mu$  - некоторая константа. Экспериментально установлено, что  $c_\mu = 0.09$ .

Уравнение для  $k$  является точным. Оно получается при подстановке значения  $k$  в уравнения Навье-Стокса (2.2). Уравнение для  $\varepsilon$  также выводится из них, с последующими преобразованиями и гипотезами относительно величины отдельных членов. Запишем уравнения модели без вывода:

$$\frac{\partial k}{\partial \tau} + \overline{U_j} \frac{\partial k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ (v + v_T) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \left( \frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U_j}}{\partial x_i} \right) \cdot \frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j} - \varepsilon \quad (5.22)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau} + \overline{U_j} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( v + \frac{v_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + c_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \left( \frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U_j}}{\partial x_i} \right) \cdot \frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j} - c_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (5.23)$$

$$\sigma_\varepsilon = 1.3; \quad c_{\varepsilon 1} = 1.44; \quad c_{\varepsilon 2} = 1.92$$

Кроме  $k$ - $\varepsilon$  существует целый ряд других дифференциальных моделей. Например, семейство моделей  $k$ - $\omega$ .

Впервые модель такого вида предложена знаменитым русским математиком Колмогоровым в 1942 году. Эта модель содержит уравнения переноса кинетической энергии турбулентности  $k$  и удельной (в единице объема) скорости диссипации энергии  $\omega$ . Иногда  $\omega^2$  определяют как осредненный квадрат пульсаций завихренности. Ее размерность – (время)<sup>-2</sup>. Она связывается с  $k$  и  $\varepsilon$  следующим соотношением:

$$\omega = \frac{\varepsilon}{c_D k} \quad (5.24)$$

где  $c_D$  - некоторая константа. Обычно полагается, что  $c_D = c_\mu = 0.09$ .

При этом далеко не все дифференциальные модели состоят из двух уравнений. К примеру распространенная в расчётов по дозвуковой

аэродинамике модель Спалларта и Алмареса содержит только одно уравнение, а модель Пола Дурбина  $v^2$ -f – четыре уравнения. У каждой из моделей есть свои преимущества и недостатки, свои требования к сетке и особенности решения. Достаточно подробно об этих особенностях излагается в [10], мы же несколько позже приведём таблицу с кратким описанием наиболее популярных моделей.

## 5.7 О моделировании течений вблизи стенки

Оказалось, что далеко не все модели турбулентности адекватно отражают процессы, происходящие в пристеночной области. Причиной этого является тот факт, что вблизи стенки силы вязкости часто преобладают над силами инерции, течение там не полностью турбулентно.

По признаку того, способна ли модель адекватно смоделировать пристеночный слой, все их делят на высокорейнольдсовские (High-Reynolds) и низкорейнольдсовские (Low-Reynolds). Низкорейнольдсовские без привлечения каких-либо дополнительных приёмов адекватно моделируют пристеночный слой (при этом им, правда, требуется гораздо более качественная сетка). Высокореинольдсовские модели на это не способны.

Самым частым приёмом для моделирования пристеночных слоёв при помощи высокорейнольдсовских моделей – метод пристеночных функций.

Известно, что пристеночная область течения может быть разбита на три зоны (см. Рисунок 5.9):

1) Вязкий подслой, в котором вязкие напряжения доминируют над реинольдсовыми и имеет место линейная зависимость скорости потока от расстояния от стенки:  $u^+ = y^+$ , где  $u^+ = \frac{\overline{U}}{u_\tau}$  – безразмерная скорость,

$y^+ = \frac{u_\tau y}{\nu}$  – безразмерное расстояние от стенки,  $u_\tau = \sqrt{\frac{\sigma_w}{\rho}}$  – динамическая скорость.

2) Буферный слой, где вязкие и реинольдсовы напряжения имеют один порядок. «Сшивая» профили скорости для вязкого подслоя и логарифмического слоя, приближенно получают:

$$u^+ = 5 \ln y^+ + 3.05 \quad (5.25)$$

3) в логарифмическом слое реинольдсовы напряжения намного превышают вязкие, а профиль скорости может быть представлен в форме логарифмического закона:

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(E \cdot y^+) \quad (5.26)$$

где  $\kappa$  - постоянная Кармана,  $E$ -постоянная, определяющая степень шероховатости (для гладкой стенки экспериментально установлено  $E = 8.8$ ).

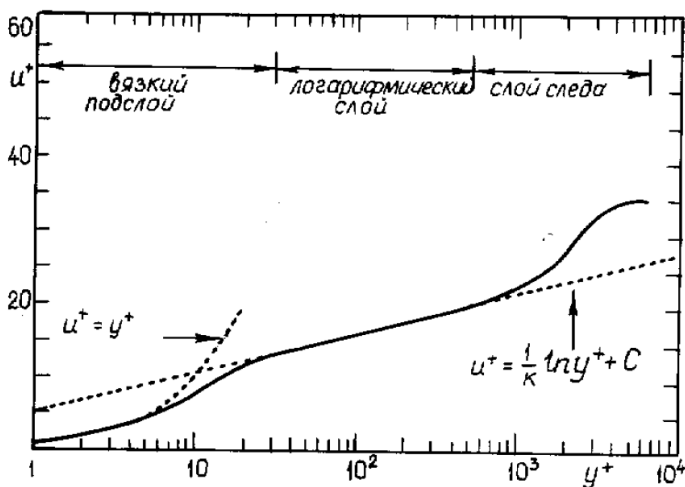


Рисунок 5.9 Структура пристеночного слоя

Описанные участки обычно объединяются в одну внутреннюю область, которая занимает порядка 20% толщины пограничного слоя и в которой генерируется около 80% всей энергии турбулентности. Одно из важных свойств внутренней области заключается в том, что профиль скорости слабо зависит от числа Рейнольдса, продольного градиента давления и прочих внешних условий (которые, тем не менее, могут вызвать уменьшение толщины внутренней области или даже полное ее вырождение). Именно это свойство послужило основой для построения универсальных соотношений (пристеночных функций), связывающих параметры течения с расстоянием от стенки. Наряду с универсальностью профиля скорости во внутренней области, метод пристеночных функций опирается на использование гипотезы о локальном равновесии энергии турбулентных пульсаций, а также свойства локальной изотропности диссипирующих вихрей.

Следует также сделать замечание по поводу требований к сетке. Обычно они выражаются через безразмерное расстояние от стенки  $y^+$  ближайшего узла. Для низкорейнольдсовских моделей  $y^+ \sim 1$ , для высокорейнольдсовских оно обычно в районе 12-13, или более.

Однако точное значение  $y^+$  может быть получено только после вычисления напряжений на стенке (т.е. уже после *решения задачи*). Поэтому сетки, после первых расчётов иногда приходится перестраивать заново, чтобы подобрать требуемое значение расстояния  $y^+$ .

Чтобы получить хотя бы примерные сведения о том, какого размера следует задавать ячейки у стенки, можно воспользоваться прикидочными формулами. Например, известно, что для круглой трубы при стационарном течении

$$\sigma_w = \xi \cdot \frac{\rho U^2}{2} \cdot \frac{l}{d} \quad (5.27)$$

где  $\xi$  – коэффициент трения, вычисляемый по эмпирическим зависимостям (см. например [15]),  $l$  – длина канала,  $d$  – диаметр канала.

## 5.8 Общие данные о некоторых моделях турбулентности

Приведём данные о самых популярных и известных моделях турбулентности:

Название модели	Тип	Высоко- или низкорейнольдсовская	Краткое описание
Модель Себеси-Смита (Сebeci-Smith)	алг.	Низкорейнольдсовская	Двухслойная модель, разделяет поток на две области – внешний поток и пристеночный слой. Применяется для высокоскоростных безотрывных потоков. Очень полезна для предварительных расчётов, когда не важна детальная физика процесса.
Модель Болдуина-Ломакса (Baldwin-Lomax)	алг.	Низкорейнольдсовская	Сходна с моделью Себеси-Смита по своим характеристикам



Название модели	Тип	Высоко- низкорейнольдсовская	или	Краткое описание
Модель Спаларта-Аллараса (Spalart-Allmaras, SA)	диф.	Низкорейнольдсовская		Модель содержит одно дифференциальное уравнение. Создавалась для задач внешней дозвуковой аэродинамики. Опыт эксплуатации модели SA показал, что ее реальные возможности заметно шире, чем предполагалось при ее создании. Более того, после введения в нее поправок на кривизну линий тока и вращение, границы ее применимости модели заметно расширились.
$\nu_T - 92$	диф.	Низкорейнольдсовская		Эта модель содержит одно уравнение. Она обеспечивает вполне удовлетворительное описание не только большинства канонических сдвиговых течений (плоская и осесимметричная струя, слой смещения в

Название модели	Тип	Высоко- или низкорейнольдсовская	Краткое описание
			несжимаемой и сжимаемой жидкости, пограничный слой на плоской пластине при отсутствии и при наличии шероховатости поверхности и др.), но и ряда более сложных течений, представляющих практический интерес.
$k - \varepsilon$	диф.	Высокорейнольдсовская	Хорошо описывает полностью развитую турбулентность. Одна из самых популярных моделей, включена во все коммерческие пакеты по вычислительной гидродинамике. Имеет целый ряд модификаций, в том числе и низкорейнольдсовские модификации.
Модель $k - \omega$ Колмогорова	диф.	Высокорейнольдсовская	Исторически самая первая модель с двумя дифференциальными уравнениями. Не содержит членов,

Название модели	Тип	Высоко- или низкорейнольдсовская	Краткое описание
			отражающих влияние молекулярной вязкости на турбулентность. Сейчас практически не применяется.
Модель $k - \omega$ Саффмена-Вилкокса	диф.	Низкорейнольдсовская	Хорошо описывает пристеночные течения. Хуже дело обстоит со свободной развитой турбулентностью.
Модель переноса касательных напряжений (Shear Stress Transport, SST) Ментера	диф.	Низкорейнольдсовская	Является комбинацией моделей $k - \varepsilon$ и $k - \omega$ . Для пристеночного слоя используется $k - \omega$ , для внешнего региона - $k - \varepsilon$ . В настоящее время эта модель является очень популярной и входит во многие пакеты вычислительной гидродинамики.
$v^2 - f$ модель	диф.	Низкорейнольдсовская	Данная модель сходна со стандартной $k - \varepsilon$ моделью, однако в ней сделана попытка учесть неізотропные эффекты. Для этого добавлено

Название модели	Тип	Высоко- или низкорейнольдсовская	Краткое описание
			уравнение для квадрата пульсаций поперечной скорости $v^2$ (что фактически представляет собой пульсацию линии тока) и специального релаксационного фактора $f$ . Таким образом, модель содержит четыре уравнения.

## 5.9 Более сложные модели турбулентности

Как упоминалось выше, модели, основанные на гипотезе Буссинеска не всегда применимы. Поэтому было разработано несколько более продвинутых подходов к моделированию турбулентных течений. Кратко рассмотрим самые важные из них.

### Модели рейнольдсовых напряжений

Точные уравнения для каждого компонента тензора (5.12) могут быть получены из уравнения (2.2). Затем выдвигаются гипотезы о возможном значении отдельных членов в этих уравнениях (модели для рейнольдсовых напряжений отличаются друг от друга как раз видом этих гипотез). К шести уравнениям для рейнольдсовых напряжений добавляется также уравнение для диссипации турбулентной энергии вида (5.23). Таким образом, модель состоит из семи дифференциальных уравнений.

Модели для реинольдсовых напряжений рекомендуется применять для моделирования сложных отрывных течений, решения задач о взаимодействии струй с препятствиями, моделирования течений в каналах сложной формы.

### DNS, LES и DES

Прямое численное моделирование (DNS), начиная с 80-х годов, достаточно быстро прогрессирует, хотя достижимые расчетные числа Рейнольдса пока еще остаются слишком низкими, чтобы интересовать инженеров. К настоящему времени получены данные DNS для ряда двумерных и трехмерных течений, в том числе с отрывом потока, и список приложений продолжает расти [10].

Более простой моделью является моделирование крупных вихрей (Large Eddy Simulation, LES). В этом подходе крупные вихри рассчитываются, а мельчайшие вихри подсеточного масштаба (Sub-Grid Scale, SGS) моделируются (см. Рисунок 5.10). Основной предпосылкой такого подхода является то, что наибольшие вихри, которые находятся под прямым воздействием граничных условий, несут максимум реинольдсовых напряжений и должны быть рассчитаны.

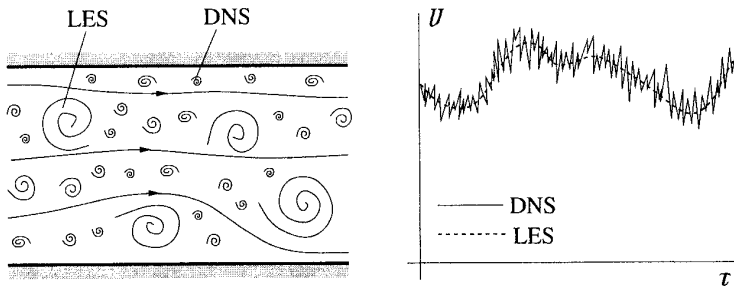


Рисунок 5.10 Схематичное представление отличий между LES и DNS

Мелкомасштабная турбулентность является слабой, содержащей меньше рейнольдсовых напряжений, и поэтому представляется менее критичной. Также она близка к изотропной и имеет близкие к универсальным характеристики. Поэтому она в большей мере поддается моделированию.

Основной приём, используемый в LES в чём-то сходен с осреднением, использованным Рейнольдсом (формула (5.2)). Любая величина представляется здесь в следующем виде:

$$\phi = \hat{\phi} + \tilde{\phi} \quad (5.28)$$

Здесь  $\hat{\phi}$  – отфильтрованная, крупномасштабная часть величины (рассчитывается),  $\tilde{\phi}$  – подсеточная часть величины (моделируется).

Основное различие между вариантами LES состоит в разном подходе к моделированию подсеточных масштабов. Подробнее о LES можно прочесть в [11].

Метод моделирования отошедших вихрей (Detached Eddy Simulation, DES) является логическим развитием LES. Суть метода заключается в том, что расчётная область разделяется на слой около стенки и остальную область. Пристеночный слой моделируется с помощью более простых моделей турбулентности (например одной из моделей с турбулентной вязкостью), а вся остальная область – с помощью LES.

## 6 Особенности расчёта химически реагирующих течений

Очень часто течение газов и жидкостей при высоких температурах сопровождается химическими реакциями. Эти реакции могут быть самыми разнообразными – от горения топлива и взаимодействия среды со стенкой, до реакций диссоциации.

В данном разделе мы рассмотрим лишь гомогенные химически реагирующие течения, не касаясь многофазных (гетерогенных) систем.

### 6.1 Основные положения

Представим течение многокомпонентной газовой смеси, в которой происходят химические реакции. Отметим, что, в отличие от многофазной смеси, все химические компоненты смешаны на молекулярном уровне.

Введем основные параметры, характеризующие газовую смесь.

Компоненты обычно обозначаются большими латинскими буквами:  $A$ ,  $B$ ,  $C$  и т.д.  $N_c$  - общее число компонентов газовой смеси;  $\rho_I$  - массовая концентрация компонента  $I$ , т.е. масса компонента  $I$  в единице объема, размерность  $[kg\ m^{-3}]$ .

Очевидно, что сумма массовых концентраций всех компонентов равна плотности газовой смеси:

$$\sum_{I=A,B,C,\dots}^{N_c} \rho_I = \rho \quad (6.1)$$

Массовая доля  $I$  – того компонента  $Y_I$  определяется по формуле:

$$Y_I = \frac{\rho_I}{\rho} \quad (6.2)$$

Из (6.1) следует, что

$$\sum_{I=A,B,C,\dots}^{N_C} Y_I = 1 \quad (6.3)$$

$[I]$ -мольная концентрация компонента  $I$  - это количество молей (киломолей) данного вещества в единице объема. Чаще всего используется размерность  $[kmol\ m^{-3}]$ .

Очевидно, что

$$[I] = \frac{\rho_I}{W_I} = \frac{\rho Y_I}{W_I} \quad (6.4)$$

где  $W_I$  - молекулярная масса компонента  $I$   $[kg\ kmol^{-1}]$ .

Суммируем (6.4) по всем компонентам

$$\sum_{I=A,B,C,\dots}^{N_C} [I] = \sum_{I=A,B,C,\dots}^{N_C} \frac{\rho Y_I}{W_I} = \rho \sum_{I=A,B,C,\dots}^{N_C} \frac{Y_I}{W_I} \quad (6.5)$$

и вводим понятие мольной доли компонента  $I$  :

$$X_I = \frac{[I]}{\sum_{I=A,B,C,\dots}^{N_C} [I]} \quad (6.6)$$

Из формул (6.4)-(6.6) следует связь между мольной и массовой долями компонента  $I$

$$X_I = \frac{Y_I / W_I}{\sum_{J=A,B,C,\dots}^{N_C} Y_J / W_J} \quad (6.7)$$



Обратную связь можно получить, если домножить уравнение (6.4) на  $W_I$ , потом просуммировать по всем компонентам и разделить полученные уравнения друг на друга:

$$Y_I = \frac{\rho_I}{\rho} = \frac{[I]W_I}{\sum_{J=A,B,C,\dots}^{N_c} [J]W_J} \quad (6.8)$$

Известно, что объемная доля компонента  $I$  равна его мольной доле.

## 6.2 Основные уравнения

Наряду с уравнениями системы (2.1)-(2.3) для многокомпонентной смеси решаются также уравнения неразрывности (переноса) для каждого компонента. Это уравнение для компонента  $I$  имеет вид (здесь используется тензорная форма записи):

$$\frac{\partial(\rho Y_I)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j Y_I)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_{Ieff} \frac{\partial Y_I}{\partial x_j} \right) + S_I \quad (6.9)$$

(I)            (II)            (III)            (IV)

где  $\Gamma_{Ieff}$  - эффективный коэффициент диффузии для компонента  $I$  :

$$\Gamma_{Ieff} = \Gamma_I + \frac{\mu_T}{Sc_T} \quad (6.10)$$

$\Gamma_I = \rho D_I$  - молекулярный коэффициент диффузии компонента  $I$  ;

$D_I$  - кинематический коэффициент диффузии;

$\mu_T$  - коэффициент турбулентной вязкости(о нём мы говорили в предыдущем разделе);

$Sc_T = \frac{\mu_T}{\rho D_T}$  - турбулентное число Шмидта, часто полагают, что

$$Sc_T = 0.9;$$

$D_T$  - кинематический коэффициент турбулентной диффузии;

$S_I$  - источник компонента  $I$  за счет химических реакций, в которых он участвует (скорость образования компонента  $I$ ) [ $kg\ m^{-3}\ s^{-1}$ ].

Физический смысл членов, входящих в уравнение (9), следующий:

Изменение концентрации компонента  $I$  (член  $I$ ) происходит за счет конвективного подвода этого компонента ( $II$ ), за счет диффузионного подвода ( $III$ ) и за счет образования компонента в результате химических реакций ( $IV$ ).

Вопросы решения уравнений, содержащих конвекцию и диффузию, достаточно подробно освещены в предыдущих разделах. Поэтому основное внимание уделим источниковому члену и его влиянию на способы решения системы уравнений (6.9).

Если в химически реагирующей системе протекают реакции, число которых равно  $N_C$ , то скорость образования компонента складывается из скоростей всех реакций, в которых он участвует.

Обычно химическую реакцию под номером  $k$  представляют в виде:



$N_C$  - число компонентов,  $v'_{kl}$  - стехиометрический коэффициент компонента  $I$  в  $k$ -ой прямой реакции (слева направо),  $v''_{kl}$  - стехиометрический коэффициент компонента  $I$  в  $k$ -ой обратной реакции (справа налево).

Скорость химической реакции  $R_k$  определяется как изменение мольной (молярной) концентрации одного из реагирующих веществ за единицу времени, т.е. размерность  $R_k$  равна [ $kmol\ m^{-3}\ s^{-1}$ ]. (Более строго говоря, в

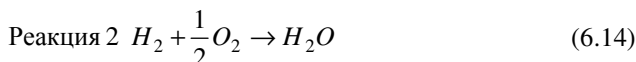
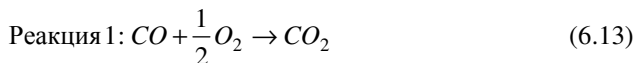
этом определении следует нормировать изменение мольной концентрации реагирующего вещества на его стехиометрический коэффициент).

С учетом (6.4) массовая скорость образования компонента  $I$ , таким образом, определяется по формуле:

$$S_I = W_I \sum_{k=1}^K (v''_{kl} - v'_{kl}) R_k \quad (6.12)$$

Проиллюстрируем эти определения на примере.

Рассмотрим взаимодействие смеси окиси углерода  $CO$  и водорода  $H_2$  с кислородом  $O_2$ . Прimitивное школьное представление этого взаимодействия выглядит так:



В этом случае скорость образования  $CO_2$  равна  $S_{CO_2} = W_{CO_2} R_1$ , скорость образования  $CO$  равна  $S_{CO} = -W_{CO} R_1$  и имеет отрицательный знак, т.е. расходуется. А вот кислород расходуется в двух операциях и его скорость образования равна  $S_{O_2} = W_{O_2} \left( -\frac{1}{2} R_1 - \frac{1}{2} R_2 \right) = -\frac{1}{2} W_{O_2} (R_1 + R_2)$ .

Вернемся к скоростям реакций.

В 1865 году Н. Н. Бекетовым и в 1867 году Гульдбергом и Вааге был сформулирован закон действующих масс:

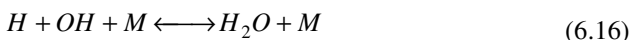
Скорость химической реакции в каждый момент времени пропорциональна концентрациям реагентов, возведенным в некоторые степени.

Для элементарных реакций показатель степени при значении концентрации каждого вещества равен его стехиометрическому коэффициенту, для более сложных реакций это правило не соблюдается.

$$R_k = \left( F_k \prod_{I=A,B,\dots}^{N_c} [I]^{V'_{ki}} - B_k \prod_{I=A,B,\dots}^{N_c} [I]^{V''_{ki}} \right) \quad (6.15)$$

где  $F_k$  и  $B_k$  - коэффициенты скоростей прямой и обратной реакции  $k$ , соответственно (размерность  $\left[ \left( \frac{m^3}{kmol} \right)^{n-1} \cdot \frac{1}{s} \right]$ ),  $n$  - порядок реакции.

Например, для реакции



Коэффициенты скоростей реакций рассчитываются по формулам:

$$F_k = A_k T^{\beta_k} \exp\left(-\frac{T_k}{T}\right) \quad (6.17)$$

$$B_k = A_k T^{\beta_k} \exp\left(-\frac{T_k}{T}\right) \quad (6.18)$$

где  $A_k$  - предэкспоненциальный множитель,

$\beta_k$  - безразмерный температурный показатель степени,

$T_k$  - температура активации,

$T$  - температура

Константы  $A_k$ ,  $\beta_k$ ,  $T_k$  имеют разное значение для прямой и обратной реакций.

А что же такое элементарные реакции?

Элементарные реакции это химические реакции, которые не могут быть представлены более простыми химическими превращениями. Элементарные реакции — составные части сложной реакции. Иногда вместо термина

«элементарная реакция» пользуются терминами «элементарная стадия» или просто «стадия» (сложной реакции).

Дело в том, что реакции, представленные формулами (6.13) и (6.14) являются сложными реакциями, и их скорость определить практически невозможно. Для математического описания процесса горения  $CO$  и  $H_2$  в кислороде необходимо представить этот процесс в виде системы элементарных реакций.

Как правило, используется схема, представленная в Таблица 6.1

Таблица 6.1 Элементарные реакции процесса горения  $CO$  и  $H_2$  в кислороде

Цепные реакции	
Реакция 1	$H + O_2 \longleftrightarrow OH + O$
Реакция 2	$O + H_2 \longleftrightarrow OH + H$
Реакция 3	$OH + H_2 \longleftrightarrow H_2O + H$
Реакция 4	$OH + OH \longleftrightarrow H_2O + O$
Реакции рекомбинации и диссоциации	
Реакция 5	$H + H + M \longleftrightarrow H_2 + M$
Реакция 6	$H + OH + M \longleftrightarrow H_2O + M$
Реакция 7	$H + O + M \longleftrightarrow OH + M$
Реакция 8	$O + O + M \longleftrightarrow O_2 + M$
Реакции с углеродом	
Реакция 9	$CO + OH \longleftrightarrow CO_2 + H$

Реакция 10	$CO + O + M \longleftrightarrow CO_2 + M$
------------	---

Значок  $\longleftrightarrow$  означает, что реакция может идти как вправо, так и влево.  $M$  в реакциях 5-8 и 10 – это так называемое третье тело; им может быть любой химический компонент, входящий в смесь. Третье тело не изменяется в результате реакции, оно только способствует распаду молекулы при соударении с ним (реакции диссоциации), либо соединению атомов или молекул в более сложные молекулы (реакции рекомбинации).

Для оценки влияния химических реакций имеет смысл ввести так называемое число Дамкелера (Damköhler number), которое для каждой реакции определяется как

$$Da = \frac{\text{скорость химической реакции}}{\text{скорость конвективного переноса}} \quad (6.19)$$

или

$$Da = \frac{\tau_{gas}}{\tau_{chem}} \quad (6.20)$$

где  $\tau_{gas}$  - характерное газодинамическое время (масштаб времени переноса вещества за счет конвекции),

$\tau_{chem}$  - характерное время протекания химической реакции.

Если рассматривать все реакции, то число Дамкелера это отношение члена в (IV) уравнении (6.9) к члену (II).

Рассмотрим более подробно, как происходит окисление водорода в системе реакций таблицы 1.

Предположим в системе появился 1 (один) атом свободного радикала  $O$ . Один из механизмов следующий:

радикал  $O$  взаимодействует с молекулой  $H_2$  через реакцию 2, и образуются один радикал  $OH$  и один радикал  $H$  ;

радикал  $H$  взаимодействует с молекулой  $O_2$  через реакцию 1, и образуются один радикал  $OH$  и один радикал  $O$  (т.е. имеется уже всего два радикала  $OH$ );

два радикала  $OH$  взаимодействуют между собой через реакцию 4, и образуются одна молекула воды  $H_2O$  и один радикал  $O$ .

Общий результат такой цепочки:



т.е. цепочка замкнулась, вместо одного радикала  $O$  получилось 2 радикала, молекулы  $H_2$  и  $O_2$  превратились в молекулу воды  $H_2O$ .

Можно рассмотреть и другие варианты цепочек.

Основной эффект реакций 1-4 это лавинообразное увеличение числа свободных радикалов  $O, H, OH$  и превращение  $H_2$  и  $O_2$  в  $H_2O$ , т.е. горение водорода в кислороде.

Реакции 1-4 называются цепными. ЦЕПНЫЕ РЕАКЦИИ – химические реакции, идущие путем последовательности одних и тех же элементарных стадий, на каждой из которых возникает одна или несколько активных частиц (атомов, свободных радикалов, ионов, ион-радикалов). В частности, по цепному механизму протекают реакции горения.

Эти реакции протекают с очень большой скоростью и считаются быстрыми. Для них  $\tau_{chem}$  очень мало.

Отток свободных радикалов осуществляется за счет медленных реакций рекомбинации 5-8. Для них характерное время протекания химических реакций  $\tau_{chem}$  значительно больше, чем для реакций 1-4.

Резонно задать вопрос, откуда в смеси  $H_2$  и  $O_2$  появляются первые свободные радикалы?

Они могут возникать в результате реакций диссоциации (реакции 4-8, идущие справа налево). Реакции диссоциации протекают только при достаточно высоких температурах.

Таким образом, для воспламенения смеси  $H_2$  и  $O_2$  необходима некоторая начальная вспышка, которая создаст достаточное количество свободных радикалов для инициирования цепных реакций горения.

**Справка из энциклопедии. Свободные радикалы** в химии — частицы (как правило, неустойчивые), содержащие один или несколько неспаренных электронов, оксиданты, в целом частицы (или интермедиаты) электронейтральны. По другому определению свободный радикал — вид молекулы или атома, способный к независимому существованию (то есть обладающий относительной стабильностью) и имеющий один или два неспаренных электрона.

Как было уже указано, характерные времена протекания химических реакций  $\tau_{chem}$  для цепных реакций и для реакций рекомбинации-диссоциации очень сильно отличаются друг от друга. Т.е. справедливо:

$$Da_{chain} > Da_{recomb} \quad (6.22)$$

$Da_{chain}$  - число Дамкелера для цепных реакций,  $Da_{recomb}$  - число Дамкелера для реакций рекомбинации-диссоциации.

Учитывать необходимо и те и другие реакции. Это порождает серьезную математическую проблему, возникающую при решении системы уравнений переноса (6.9), т.к. эта система является *жесткой*.

В следующем пункте мы рассмотрим понятие жесткости систем уравнений.



### 6.3 Жёсткие системы

Рассмотрим пример (**пример 1**). Пусть имеется система уравнений

$$\begin{cases} \frac{dy_1}{dt} = \lambda_1 y_1 \\ \frac{dy_2}{dt} = \lambda_2 y_2 \end{cases} \quad (6.23)$$

с начальными условиями

$$y_1(0) = y_2(0) = 1 \quad (6.24)$$

Зададим значения числовых коэффициентов равными:  $\lambda_1 = -1$  и  $\lambda_2 = -10^6$

Система легко решается аналитически, и ее решение имеет вид:

$$y_1(t) = e^{-t}; \quad y_2(t) = e^{-10^6 t} \quad (6.25)$$

Нам интересно проверить решение системы численными методами, поэтому используем для решения системы (6.23) **явный метод Эйлера**.

Из теории численных методом известно, что для сходимости решения конечно-разностных уравнений к точному решению необходима так называемая устойчивость разностной схемы.

Метод Эйлера применительно к системе (6.23) дает следующее численное решение:

$$\begin{aligned} \frac{y_i^{n+1} - y_i^n}{\tau} &= \lambda y_i^n; \\ y_i^{n+1} &= y_i^n + \tau \lambda_i y_i^n = y_i^n (1 + \tau \lambda_i) \end{aligned} \quad (6.26)$$

где

$i = (1, 2)$ ,  $\tau$  - шаг конечно-разностной сетки,

$y_i^n$  - значение  $y_i$  на  $n$ -ом шаге по  $t$ ,

$y_i^{n+1}$  - значение  $y_i$  на  $(n+1)$ -ом шаге по  $t$ .

Конечно-разностная сетка задается соотношением:

$$t^n = n\tau \quad (6.27)$$

Таким образом,

$$y_i^1 = (1 + \tau\lambda_i), y_i^2 = (1 + \tau\lambda_i)^2, \dots, y_i^n = (1 + \tau\lambda_i)^n \quad (6.28)$$

Условием устойчивости разностной схемы (6.26) является:

$$|\lambda_1\tau + 1| < 1; \quad |\lambda_2\tau + 1| < 1 \quad (6.29)$$

т.е.  $\tau < 2 \cdot 10^{-6}$

Предположим, что нам необходимо определить решение системы при  $t = 3$ . Точное решение (25) равно:  $y_1(3) = 0,049787$ ,  $y_2(3) = e^{-3 \cdot 10^6}$ . Значение  $y_2$  выходит за рамки разрядности любой вычислительной машины и фактически равно нулю.

Решение конечно-разностного уравнения (6.26) с учетом (6.27) и (6.28) имеет вид:

$$y_i(t) = (1 + \lambda_i\tau)^{(t/\tau)} \quad (6.30)$$

При шаге  $\tau = 5 \cdot 10^{-7}$  и  $t = 3$  получаем:  $y_1(3) = (1 - 10^{-6})^{(3/10^{-6})} = 0.04978$ ,  $y_2(3) = 0$

Для более раннего момента времени  $t = 10^{-4}$  при том же шаге  $\tau = 5 \cdot 10^{-7}$  получаем: точное решение -  $y_1(10^{-4}) = 0,9999$ ,  $y_2(10^{-4}) = 3.72 \cdot 10^{-44}$ ; численное решение -  $y_1(10^{-4}) = 0,9999$ ,  $y_2(10^{-4}) = 6.22 \cdot 10^{-61}$

Мы видим, что для  $y_1$  выбранный шаг дает хорошее совпадение для обоих моментов времени; для  $y_2$  относительное совпадение плохое, но самом деле это не имеет большого значения, т.к. в обоих случаях решение фактически равно нулю.

Для получения более точного численного решения второго уравнения необходимо еще больше уменьшить шаг интегрирования. Например, если

$\tau = 1 \cdot 10^{-9}$ , то численное решение при  $t = 10^{-4}$  гораздо ближе к точному решению:  $y_2(10^{-4}) = 3.54 \cdot 10^{-44}$ .

С другой стороны для получения хорошей точности при решении первого уравнения совсем необязательно задавать такой маленький шаг как  $\tau = 5 \cdot 10^{-7}$ . При шаге в 20000 раз больше, т.е. при  $\tau = 1 \cdot 10^{-2}$  получаем численное решение:  $y_1(3) = 0,049$ ,  $y_1(10^{-4}) = 0,9999$  - очень близкое к точному решению.

Систематизируем полученные данные в Таблица 6.2 и Таблица 6.3

Таблица 6.2 Сравнение точного и приближенного решения при различных шагах по времени

Время $t = 3$				
Шаг $\tau$	$y_1$ точное решение	$y_1$ численное решение	$y_2$ точное решение	$y_2$ численное решение
$5 \cdot 10^{-7}$	0,049787	0,049787	0	0
$1 \cdot 10^{-2}$		0,04904 (погрешность 1.5%)		решение невозможно
$1 \cdot 10^{-9}$		0,049787		0

Таблица 6.3 Сравнение точного и приближенного решения при различных шагах по времени

Время $t = 1 \cdot 10^{-4}$				
Шаг $\tau$	$y_1$ точное решение	$y_1$ численное решение	$y_2$ точное решение	$y_2$ численное решение
$5 \cdot 10^{-7}$	0,9999	0,9999	$3.72 \cdot 10^{-44}$	$6.22 \cdot 10^{-61}$
$1 \cdot 10^{-2}$		0,9999		решение невозможно
$1 \cdot 10^{-9}$		0,9999		$3.54 \cdot 10^{-44}$

Основной вывод, который можно сделать, исходя из полученных результатов, состоит в том, что шаги  $\tau$  оптимальные для первого и второго уравнения отличаются друг от друга на несколько порядков. Это приводит к большим неприятностям. Решать первое уравнение с шагом  $1 \cdot 10^{-9}$  непозволительная роскошь с точки зрения расходования вычислительных ресурсов, а использовать шаг  $1 \cdot 10^{-2}$  для второго уравнения невозможно с точки зрения устойчивости.

Вообще говоря, трудности численного решения подобных систем, получивших название **жестких**, связаны с выбором шага интегрирования. Дело в том, что характерные времена исследуемых процессов могут различаться в  $10^6$  раз. Следовательно, если при численном решении системы необходимо выбирать шаг по самому быстрому процессу. В данном случае затраты машинного времени для исследования самых медленных процессов будут неоправданно велики.

По этой причине имеются следующие альтернативы в выборе подхода к численному решению рассматриваемых задач.

1. Численно решать систему с шагом, выбранным по условию (6.29), т.е. с учетом характерных времен всех процессов, описываемых данной системой.

2. Решать систему ОДУ с различными шагами, соответствующими физическим процессам с существенно различными характерными временами. В этом случае необходимо задавать условия перехода к другому шагу интегрирования.

3. «Пренебречь» быстропротекающими процессами и численно рассматривать лишь медленные, проводя интегрирование с шагом, превышающим характерные времена быстрых процессов. В этом случае придется конструировать численные методы, позволяющие проводить расчеты с шагом большим, чем выбираемым по условию (6.29).

Недостатки альтернативы 1 мы уже показали.

Второй подход приемлем для только что рассмотренной задачи, когда правая часть первого уравнения зависит только от первой функции, а правая часть второго – только от второй. В общем случае в правой части каждого уравнения могут быть все искомые функции.

Систему уравнений (6.23) и начальных условий (6.24) удобно представить в матричном виде:

$$\frac{dy}{dt} = Ay; \quad y(0) = y_0 \quad (6.31)$$

где  $y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix}$  - вектор искомых функции,  $A$  - матрица коэффициентов,

$y_0$  - начальное значение вектора  $y$ ,  $N$  - число искомых функций.

В рассмотренном примере матрица коэффициентов им диагональный вид

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -10^6 \end{pmatrix}; \quad y_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (6.32)$$

и каждое уравнение системы можно решать отдельно.

В общем случае необходимо решать всю систему совместно. Поэтому нам представляется наиболее оптимальным использовать подход, основанный на альтернативе 3.

Но сначала давайте подробнее исследуем понятие жесткости систем обыкновенных дифференциальных уравнений.

Описанная выше ситуация возникает из-за большого разброса собственных значений матрицы системы (6.31):  $\frac{\lambda_2}{\lambda_1} = 10^6$ . Компонента с бóльшим (по модулю) собственным значением вынуждает выбирать мелкий шаг и, одновременно, быстро перестает влиять на решение. Класс дифференциальных уравнений с таким поведением выделяется в теории численных методов понятием жестких уравнений.

Точнее, система линейных автономных дифференциальных уравнений (6.31) называется жесткой, если, во-первых, все собственные значения  $\lambda_i$  матрицы  $A$  имеют отрицательную вещественную часть (т. е. система (6.31) экспоненциально устойчива).

$$\operatorname{Re}(\lambda_i) < 0, \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (6.33)$$

и, во-вторых,

$$S = \frac{\max_{1 \leq i < N} |\operatorname{Re}(\lambda_i)|}{\min_{1 \leq i < N} |\operatorname{Re}(\lambda_i)|} > 1 \quad (6.34)$$

Число  $S$  при этом называют коэффициентом жесткости системы (6.31). Значок  $\gg$  ("значительно превосходит") на практике обычно означает, что  $S >$

100, хотя в химической кинетике часто встречаются задачи с коэффициентом жесткости  $\approx 10^6$  и более.

Более подробно с понятиями жёсткости и устойчивости систем дифференциальных уравнений можно ознакомиться в [6, 23].

Попробуем применить к системе (6.31) **явный метод Эйлера**.

$$\frac{y^{n+1} - y^n}{\tau} = Ay^{n+1} \quad (6.35)$$

т.е.

$$y^{n+1} = (E - A\tau)^{-1} y^n \quad (6.36)$$

где  $E$  - единичная матрица

Отсюда получаем:

$$y^1 = (E - A\tau)^{-1} y_0, y^2 = ((E - A\tau)^{-1})^2 y_0, \dots, y^n = ((E - A\tau)^{-1})^n y_0 \quad \text{Текст 1}$$

**Пример 2.** Для системы (6.23), рассмотренной в предыдущем примере, матрица  $E - A\tau = \begin{pmatrix} 1+\tau & 0 \\ 0 & 1+10^6\tau \end{pmatrix}$ , а обратная ей:

$$(E - A\tau)^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{1+\tau} & 0 \\ 0 & \frac{1}{1+10^6\tau} \end{pmatrix} \quad (6.38)$$

Тогда решение на  $n$ -ом шаге интегрирования получается равным:

$$y^n = \begin{pmatrix} \frac{1}{(1+\tau)^n} \\ \frac{1}{(1+10^6\tau)^n} \end{pmatrix} \quad (6.39)$$

Если взять  $\tau = 1 \cdot 10^{-2}$  (это максимальное значение шага, использованного в предыдущем примере), то получим результаты, представленные в Таблица

6.4

Таблица 6.4 Сравнение численного решения неявным методом Эйлера с аналитическим

Время $t = 3$				
Шаг $\tau$	$y_1$ точное решение	$y_1$ численное решение	$y_2$ точное решение	$y_2$ численное решение
$1 \cdot 10^{-2}$	0,049787	0,05053 (погрешность 1.5%)	0	0

Основным преимуществом, полученным в результате использования неявного метода Эйлера, является возможность **совместно** решать **всю** систему с шагом интегрирования намного превосходящим шаг, полученным из критерия устойчивости (6.29). При этом появляется возможность ориентироваться только на медленные процессы, проводя интегрирование с шагом, превышающим характерные времена быстрых процессов.

Рассмотрим еще один пример, менее жесткий, в котором вторая функция не столь быстро уходит в нуль.

**Пример 3.** Пусть матрица коэффициентов и начальный вектор равны

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 99 \\ 0 & -100 \end{pmatrix}; \quad y_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (6.40)$$

Собственные значения матрицы равны (-1, -100). Они имеют отрицательную вещественную часть, т.е. решение экспоненциально устойчиво. Коэффициент жесткости системы равен 100.

Точное решение системы:

$$y = \begin{pmatrix} 2e^{-t} + 100e^{-100t} \\ e^{-100t} \end{pmatrix} \quad (6.41)$$



Результаты расчета для 2-х моментов времени представлены в таблицах 5,6

Таблица 6.5 Сравнение численного решения неявным методом Эйлера с аналитическим

Время $t = 0.1$				
Шаг $\tau$	$y_1$ точное решение	$y_1$ численное решение	$y_2$ точное решение	$y_2$ численное решение
0.01	1.814215	1.81 (погрешность 0.25%)	$4.54 \cdot 10^{-5}$	$9.76 \cdot 10^{-4}$
0.1		1.73 (погрешность 5%)		$9.1 \cdot 10^{-2}$

Таблица 6.6 Сравнение численного решения неявным методом Эйлера с аналитическим

Время $t = 1$				
Шаг $\tau$	$y_1$ точное решение	$y_1$ численное решение	$y_2$ точное решение	$y_2$ численное решение
0.01	0.7357589	0.739 (погрешность 0.5%)	$3.78 \cdot 10^{-44}$	$7.9 \cdot 10^{-31}$
0.1		0.771 (погрешность 5%)		$3.86 \cdot 10^{-11}$

Таким образом, мы получили неплохую точность для медленных процессов.

## Алгоритм Розенброка

Рассмотренные численные схемы имеют первый порядок аппроксимации.

Приведем еще один метод, основанный на популярном алгоритме Розенброка, реализованного в ряде математических пакетов. Он основан на приведении системы (6.31)

$$\frac{dy}{dt} = Ay$$

к разностной схеме

$$(E - \alpha\tau A - \beta\tau^2 A^2) \cdot \frac{y^{n+1} - y^n}{\tau} = A \cdot (y^n + \gamma \cdot \tau \cdot A \cdot y^n) \quad (6.42)$$

Числовые коэффициенты подбираются таким образом, чтобы обеспечить максимально возможный порядок точности. Они равны:

$$\alpha = 1.077, \quad \beta = -0.372, \quad \gamma = -0.577 \quad (6.43)$$

Применим этот метод к примеру 3 и получим результаты для 3-моментов времени:

Таблица 6.7 Сравнение численного решения по алгоритму Розенброка с аналитическим

Время $t = 0.1$				
Шаг $\tau$	$y_1$ точное решение	$y_1$ численное решение	$y_2$ точное решение	$y_2$ численное решение
0.01	1.814215	1.8096	$4.54 \cdot 10^{-5}$	$3.3 \cdot 10^{-5}$
0.1		2.192		-0.382

Таблица 6.8 Сравнение численного решения по алгоритму Розенброка с аналитическим

Время $t = 1$				
Шаг $\tau$	$y_1$ точное решение	$y_1$ численное решение	$y_2$ точное решение	$y_2$ численное решение
0.01	0.7357589	0.73576	$3.78 \cdot 10^{-44}$	$1.4 \cdot 10^{-45}$
0.1		0.7357		$6.7 \cdot 10^{-5}$

Таблица 6.9 Сравнение численного решения по алгоритму Розенброка с аналитическим

Время $t = 3$				
Шаг $\tau$	$y_1$ точное решение	$y_1$ численное решение	$y_2$ точное решение	$y_2$ численное решение
0.01	$9.9574 \cdot 10^{-2}$	$9.9574 \cdot 10^{-2}$	0	0
0.1		$9.9561 \cdot 10^{-2}$		$3 \cdot 10^{-13}$

При шаге  $\tau = 0.01$  мы получили хорошие результаты как для медленно меняющейся функции  $y_1$ , так и для быстроменяющейся функции  $y_2$ .

Для большего шага  $\tau = 0.1$  получено удовлетворительно согласование для  $y_1$ , а функция  $y_2$  попеременно «выскакивает» в отрицательную область, что, конечно, вряд ли годится для серьезных задач.

## 6.4 Решение жёстких систем применительно к задачам химической кинетики

В предыдущем параграфе было введено понятие жесткости систем линейных обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) и много внимания было уделено способам их решения.

Спрашивается, какое это имеет отношение к расчету химически реагирующих течений? Самое прямое. Дело в том, что система уравнений неразрывности химических компонентов (6.9), во-первых, также является жесткой, а, во-вторых, для ее решения применимы все те идеи и методы, которые были изложены в п. 6.3.

Рассмотрим для начала систему (6.9) без учета конвекции и диффузии:

$$\frac{d(\rho Y_I)}{dt} = S_I \quad (6.44)$$

В векторной форме это уравнение можно представить в виде:

$$\frac{d\mathbf{Y}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{Y}) \quad (6.45)$$

где  $\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_{N_c} \end{pmatrix}$  - вектор массовых долей компонентов,

$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} S_1 / \rho \\ S_2 / \rho \\ \vdots \\ S_{N_c} / \rho \end{pmatrix}$  - вектор источников

К уравнению (6.45) можно применить те же методы, что и к линейным ОДУ, только вместо матрицы постоянных коэффициентов необходимо использовать матрицу Якоби:

$$A = \frac{\partial f}{\partial Y} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial Y_1} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial Y_N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_{Nc}}{\partial Y_1} & \dots & \frac{\partial f_{Nc}}{\partial Y_N} \end{pmatrix} \quad (6.46)$$

**Неявный метод Эйлера** применительно к системе (6.45) имеет вид:

$$\frac{y^{n+1} - y^n}{\tau} = f^n + A(y^{n+1} - y^n) \quad (6.47)$$

Откуда

$$(E - \tau A^n) \frac{y^{n+1} - y^n}{\tau} = f^n \quad (6.48)$$

**А метод Розенброка:**

$$(E - \alpha \tau A - \beta \tau^2 A^2) \cdot \frac{y^{n+1} - y^n}{\tau} = f(y^n + \gamma \cdot \tau \cdot f(y^n)) \quad (6.49)$$

Решение (6.49) основано на следующих действиях, выполняемых на каждом  $n$ -ом шаге интегрирования:

1. Вычисляется матрица производных (6.48) в точке  $y^n$
2. Следующая точка  $y^{n+1}$  находится из матричного уравнения (6.49) с коэффициентами (6.43)

Приведем классический пример – систему Робертсона. Рассмотрим систему трех уравнений:

$$\begin{cases} \frac{dy_1}{dt} = -a_1 y_1 + a_2 y_2 y_3, \\ \frac{dy_2}{dt} = a_1 y_1 - a_2 y_2 y_3 - a_3 y_2, \\ \frac{dy_3}{dt} = a_3 y_2 \end{cases} \quad (6.50)$$

Начальные условия:  $y_1(0)=1$ ,  $y_2(0)=0$ ,  $y_3(0)=0$

Система (6.50) представляет модель химического взаимодействия трех веществ: вещество «1» медленно превращается в «2»: «1» → «2» (со скоростью  $a_1 = 0.1$ ), вещество «2» превращается очень быстро в вещество «3»: «2» → «3» ( $a_3 = 10^3$ ).

И, наконец, вещество «2» при каталитическом воздействии вещества «3», превращается в вещество «1» ( $a_2 = 10^2$ ): «2» + «3» → «1» + «3»

Используем метод Розенброка.

Матрица Якоби имеет вид:

$$A = \begin{pmatrix} -a_1 & a_2 y_3 & a_2 y_2 \\ a_1 & -a_2 y_3 - a_3 & -a_2 y_2 \\ 0 & a_3 & 0 \end{pmatrix}$$

Результаты расчета представлены на рисунке

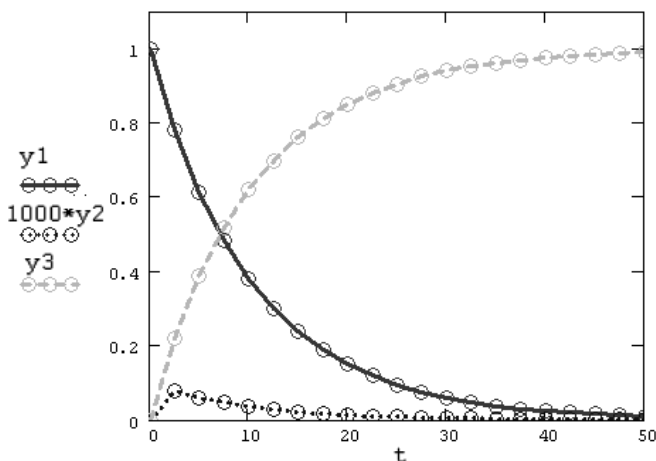


Рисунок 6.1 Результат решения системы (6.50)

## 6.5 Метод расщепления для системы уравнений переноса химических компонентов

Основную систему (6.9) можно представить в векторной форме

$$\frac{\partial \mathbf{Y}}{\partial t} = \mathbf{L}(\mathbf{Y}) + \mathbf{f}(\mathbf{Y}) \quad (6.52)$$

где  $\mathbf{L}(\mathbf{Y})$  - оператор, учитывающий диффузию и конвекцию:

$$\mathbf{L}(\mathbf{Y}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_{leff} \frac{\partial \mathbf{Y}}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial (\rho u_j \mathbf{Y})}{\partial x_j} \quad (6.53)$$

$\mathbf{f}(\mathbf{Y})$  - вектор источников (см. п. 6.4). В системе (6.52) лучше отдельно рассматривать процессы переноса (конвекция и диффузия) и процесс образования компонента в результате химических реакций. Поэтому для ее решения имеет смысл применить *метод расщепления по физическим*

*процессам*. Он состоит в следующем. На каждом шаге по времени вместо системы уравнений (54) решается последовательность уравнений:

$$\frac{\partial Y_1}{\partial t} = L(Y_1) \quad (6.54)$$

$$\frac{\partial Y_2}{\partial t} = f(Y_2) \quad (6.55)$$

при выполнении условий:

$$\begin{cases} Y_1(t^n) = Y(t^n), \\ Y_2(t^n) = Y_1(t^{n+1}), \\ Y(t^{n+1}) = Y_2(t^{n+1}) \end{cases} \quad (6.56)$$

В работе [24] показано, что для сходимости такой системы (т.е. аппроксимации и устойчивости) достаточно, чтобы сходилась каждая из систем (6.54) и (6.55).

Схема расщепления позволяет существенно сократить вычислительные ресурсы.

В каждое уравнение системы (6.54) входит только один химический компонент; таким образом, можно решать каждое уравнение отдельно. При численном решении это приводит к системе, состоящей из  $N_{nodes}$  уравнений ( $N_{nodes}$  - число узлов сетки).

Уравнение (6.55) решается для каждого узла сетки для всех компонентов. Число неизвестных в нем равно  $N_C$ .

Если же решать сразу всю систему (54), то число неизвестных будет равно  $N_{nodes} \times N_C$ .



## 7 Метод конечных элементов в тепловых расчётах

Метод конечных элементов представляет собой совершенно иной подход к решению задач. Сама постановка задачи в случае использования МКЭ совсем иная, она связана с вариационным исчислением. В данном разделе мы кратко рассмотрим суть вариационных принципов и МКЭ.

### 7.1 Основные понятия вариационного исчисления

Вариационное исчисление было основано в XVIII в. Л. Эйлером и Ж. Лагранжем. Впоследствии оно активно развивалось и сейчас представляет собой один из важнейших разделов теоретической и прикладной математики.

Задачи вариационного исчисления тесно связаны с задачами о нахождении экстремума, однако исследуются на экстремум в данном случае не функции одной или нескольких переменных, а выражения, названные *функционалами*.

В п. 2 определение функционала уже давалось. Оператор  $I[f(x)]$  называется функционалом, заданным на некотором множестве функций, если каждой функции  $f(x)$  ставится в соответствие определённое числовое значение  $I[f(x)]$ . Математики различают несколько видов функционалов, однако нас будет интересовать только один из их видов – интегральный функционал, который представляет собой некий интеграл, который при подстановке в него какой-либо определённой функции принимает определённое числовое значение.

Приведём простой пример функционала:

$$I[y(x)] = \int_0^1 y(x) dx \quad (7.1)$$

Если мы положим в выражении (7.1), что  $y(x) = x$ , то функционал  $I[y]$  примет значение  $1/2$ , если  $y(x) = x^2$ , то  $I[y] = 1/3$  и т.д. Т.е.  $I[y]$  – «функция от функции», его числовое значение полностью зависит от того, какую функцию  $y$  мы в него подставим. Оказалось также, что часто существует какая-либо функция, которая придаёт функционалу минимальное значение. Основной задачей вариационного исчисления является как раз нахождение функции, *минимизирующей* заданный функционал.

Вариационный принцип получил широкое распространение в физике. Широко известен принцип Гамильтона (или принцип наименьшего действия) в механике, который гласит, что любая механическая система характеризуется определённой функцией координат, скоростей и времени, которая удовлетворяет следующему условию.

Пусть в моменты времени  $t = t_1$  и  $t = t_2$  механическая система занимает определённые положения, характеризуемые координатами  $x_1$  и  $x_2$ . Тогда между этими положениями система движется таким образом, чтобы интеграл

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(x, \dot{x}, t) dt \quad (7.2)$$

имел наименьшее возможное значение (через  $\dot{x}$  здесь обозначается производная от  $x$  по времени). Функция  $L$  называется функцией Лагранжа данной системы, а интеграл (7.2) – действием. В курсе теоретической механики показывается, что  $L = E_k - \Pi$ , т.е. разность кинетической и потенциальной энергии системы.

Как известно из курса математического анализа, для функции в точке экстремума  $y(x)$  имеет место равенство  $dy = y' dx = 0$ , т.е. производная и дифференциал функции в точке экстремума равны нулю.

Похожее равенство имеет место и для функционалов, только в данном случае вместо дифференциала вводится понятие *вариации*. Для функционала

вида  $I = \int_a^b F(x, y) dx$  получим:

$$\delta I = \delta \int_a^b F(x, y) dx = \int_a^b \frac{\partial F(x, y)}{\partial y} \delta y dx \quad (7.3)$$

По аналогии с условием экстремума функции, условие экстремума функционала может быть записано как:

$$\delta I = 0 \quad (7.4)$$

Если функционал зависит не только от самой функции  $y$ , но и от её производной  $y'$ , то вариация данного функционала может быть записана в виде:

$$\delta I = \delta \int_a^b F(x, y, y') dx = \int_a^b \left( \frac{\partial F(x, y, y')}{\partial y} \delta y + \frac{\partial F(x, y, y')}{\partial y'} \delta y' \right) dx \quad (7.5)$$

Для нахождения функции  $L$  в функционале вида (7.2) с помощью использования понятия вариации может быть получено следующее дифференциальное уравнение, называемое уравнением Эйлера-Лагранжа (вывод его см. например в [6, 19]):

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \quad (7.6)$$

которое в случае, если степеней свободы у системы несколько (например,  $n$ ), преобразуется в системы из  $n$  уравнений:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial x_i} = 0, \text{ где } i = 1, 2, \dots, n \quad (7.7)$$

Следует отметить, что уравнения вида (7.7) универсальны и могут быть применены к любой механической системе. С помощью них в частности

можно вывести уравнения движения жидкости, которые мы выводили в п. 1.3, используя второй закон Ньютона для элементарного объёма.

## 7.2 Основные концепции МКЭ на примере решения задач теплопроводности

Проиллюстрируем идею метода на решении стационарной двухмерной задачи теплопроводности. Уравнение теплопроводности в данном случае будет иметь вид:

$$\lambda_x \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \lambda_y \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + Q_V = 0 \quad (7.8)$$

Граничные условия возьмём самые общие. Допустим, что на границах области имеет место и тепловой поток вида  $q_w$  и конвективный тепловой поток вида  $\alpha(T_w - T_f)$ .

Если бы мы решали задачу о распространении тепла методом конечных объёмов или разностей, то отправной точкой в решении являлось бы именно уравнение (7.8). В случае же вариационной постановки задачи отправной точкой является функционал, условия минимизации которого, и приводят в конечном итоге к (7.8). Для двухмерной стационарной задачи теплопроводности этот функционал выглядит следующим образом:

$$I[T(x, y)] = \iint_D \left[ \lambda_x \left( \frac{\partial T}{\partial x} \right)^2 + \lambda_y \left( \frac{\partial T}{\partial y} \right)^2 - 2Q_V T \right] dx dy + \int_L (\alpha T^2 - 2q_w T) dl \quad (7.9)$$

где  $D$  – рассматриваемая область,  $L$  – её граница.

Данный функционал может быть получен из принципов неравновесной термодинамики (об этих принципах см. [20, 21]) или путём преобразований уравнения (7.8) [20] (умножение на вариацию температуры  $\delta T$  с последующим интегрированием).

Суть МКЭ состоит в том, что рассматриваемая область разбивается на ряд *элементов*, в каждом из которых задаётся закон изменения температуры. Таким образом, мы ищем температуру в виде набора кусочно-гладких функций координат. Здесь может быть наглядна аналогия с интерполяцией данных с помощью сплайнов. Классический сплайн одной переменной строится так: область определения разбивается на конечное число отрезков, на каждом из которых сплайн совпадает с некоторым алгебраическим выражением. Обычно в качестве таких выражений используют прямые линии, а также квадратные или кубические параболы.

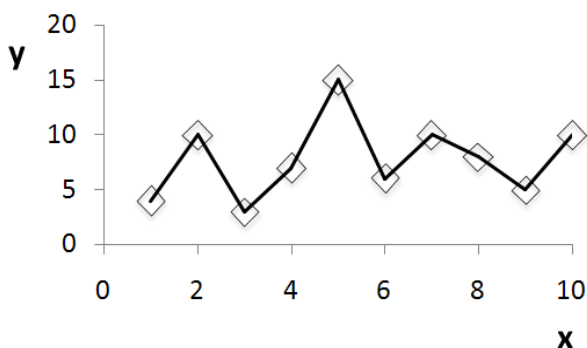


Рисунок 7.1 Линейный сплайн

На Рисунок 7.1 показан линейный сплайн (сплошная линия). С помощью него интерполируется ряд значений  $y$  (значения показаны квадратиками) в зависимости от  $x$  (такой ряд значений мог быть получен, скажем, из эксперимента) Фактически такой сплайн представляет собой соединение имеющихся точек прямыми линиями (в случае параболического сплайна это были бы параболы и т.д.).

Разница между интерполяцией сплайнами и МКЭ заключается в том, что в случае интерполяции значения интерполируемой функции нам известны, а в случае решения дифференциальных уравнений методом конечных элементов значения интерполируемой функции нам ещё предстоит найти.

Итак, мы представляем температуру как набор кусочно-гладких функций:

$$T(x, y) \approx \sum_{n=1}^N a_n f_n(x, y) \quad (7.10)$$

где  $a_n$  – неизвестные коэффициенты, имеющие размерность температуры,  $f_n(x, y)$  – заданные функции координат.

Если подставить температуру в виде (7.10) в функционал (7.9), то мы получим, что  $I[T(x, y)]$  уже не является «функцией от функции», а зависит только от неизвестных коэффициентов  $a_n$ .

Таким образом, для минимизации функционала (7.9) необходимо найти соответствующие значения неизвестных коэффициентов  $a_n$ . Из курса математического анализа известно, что такие значения находятся из системы уравнений:

$$\frac{\partial I}{\partial a_1} = 0, \dots, \frac{\partial I}{\partial a_N} = 0 \quad (7.11)$$

Остаётся лишь правильным образом определить координатные функций. Поскольку мы с самого начала сказали, что представляем температуру в виде совокупности *кусочно-гладких функций*, то очевидно, что координатная функция узла  $n$  отлична от нуля только в элементах, содержащих этот узел. Кроме того введём дополнительные требования: координатная функция  $f_n$  в узле  $n$  с координатами  $x = x_n, y = y_n$  должна быть равна 1, а в остальных узловых точках – нулю. То есть в конкретном узле *отлична от нуля только координатная функция данного узла*.

Налагая такие условия на координатные функции, мы придаём прозрачный физический смысл коэффициентам  $a_n$ . При таком выборе координатных функций они равны приближённому значению  $u_n$  в узле  $n$ . Это легко продемонстрировать:

$$T(x_n, y_n) \approx \sum_{m=1}^N a_m f_m(x_n, y_n) = a_n f_n = a_n \cdot 1 = u_n \quad (7.12)$$

Таким образом, при использовании разложения (7.10) в любой точке пространства «работают» только те координатные функции, у которых коэффициенты равны приближённым значениям температур элемента, содержащего данную точку [1].

Отсюда уравнения (7.11) можно записать в виде:

$$\frac{\partial I}{\partial u_1} = 0, \dots, \frac{\partial I}{\partial u_N} = 0 \quad (7.13)$$

Координатные функции  $f_n$  строятся на основе функций формы каждого элемента. Каждая из функций формы равна 1 в «своей» узловой точке и нулю во всех других узлах данного элемента. Вне элемента все его функции формы также считаются равными нулю. Очевидно, что для каждого элемента требуется количество функций формы, соответствующее количеству узлов в элементе. Таким образом, функция формы  $m$ -ого элемента, равная 1 в принадлежащей ему узловой точке  $n$ , является как бы «представителем» координатной функции. Поэтому температурное поле в элементе аппроксимируется суммой произведений его функций формы на приближённые значения температуры в узлах этого элемента. Очевидно, что для каждого элемента аппроксимация своя, но границах при этом должна сохраняться непрерывность поля температуры.

### 7.3 Выбор типа элементов и составление функций формы

Выбор типа элементов является первым этапом в решении задачи с помощью МКЭ. Существует несколько типов конечных элементов. Виды плоских элементов представлены на Рисунок 7.2.

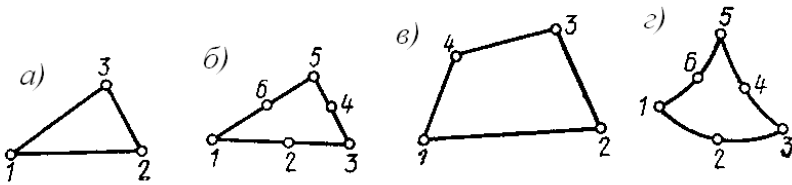


Рисунок 7.2 Виды конечных элементов для плоских задач.

Как видно из рисунка, чаще всего применяют элементы треугольной формы (их ещё называют 2-симплексами), четырёхугольники и криволинейные треугольники.

При решении трёхмерных задач конечные элементы могут представлять собой тетраэдры (иначе – 3-симплексы), шестигранники, призмы и т.д. (см. Рисунок 7.3)

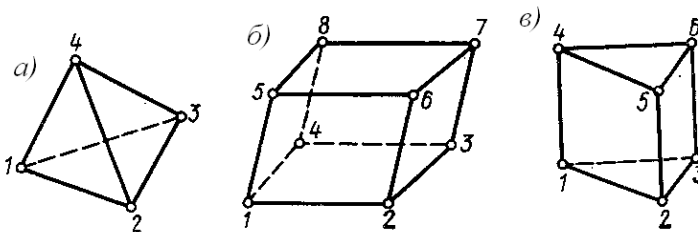


Рисунок 7.3 Трёхмерные конечные элементы



Каждому из видов элементов соответствует свой особый вид функций формы. Здесь мы ограничимся лишь рассмотрением линейных плоских треугольных элементов (Рисунок 7.2., а). О функциях формы более сложных элементов можно прочесть, например, в [22].

Название «линейные» для рассматриваемых элементов обусловлено тем, что при наличии на границе элемента лишь трёх узлов можно использовать функции формы, зависящие от координат только линейно:

$$F(x, y) = a + bx + cy \tag{7.14}$$

Более сложные элементы (Рисунок 7.2., б, г) позволяют использовать более сложные законы распределения температуры в элементе. Например для треугольного элемента с 6 узлами (Рисунок 7.2., б) функция формы имеет вид квадратного полинома:

$$F(x, y) = a + bx + cy + dx + ex^2 + fy^2 \tag{7.15}$$

Итак, рассчитаем коэффициенты в формуле (7.14).

Рассмотрим единичный треугольный элемент, обозначив его узлы как  $i, j, k$ .

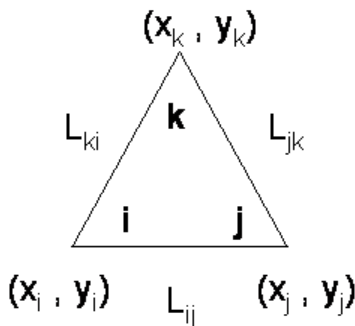


Рисунок 7.4 Треугольный элемент

Расчет длин сторон треугольных линейных элементов производится по следующим формулам:

$$\left. \begin{aligned} L_{ij} &= \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} \\ L_{jk} &= \sqrt{(x_j - x_k)^2 + (y_j - y_k)^2} \\ L_{ki} &= \sqrt{(x_k - x_i)^2 + (y_k - y_i)^2} \end{aligned} \right\} \quad (7.16)$$

Площадь рассчитывается следующим образом:

$$S = \frac{x_j y_k - x_k y_j + y_j x_i - y_k x_i + x_k y_i - x_j y_i}{2} \quad (7.17)$$

Данные формулы выводятся в курсе аналитической геометрии (см. например [7]).

Исходя из приведённых выше условий, по которым функция формы равна единице в «своём» узле и нулю во всех других узлах, можно рассчитать коэффициенты в формуле (7.14):

$$\left[ \begin{array}{l} a_i = \frac{x_j y_k - x_k y_j}{2S} \\ b_i = \frac{y_j - y_k}{2S} \\ c_i = \frac{x_k - x_j}{2S} \end{array} \right] ; \left[ \begin{array}{l} a_j = \frac{x_k y_i - x_i y_k}{2S} \\ b_j = \frac{y_k - y_i}{2S} \\ c_j = \frac{x_i - x_k}{2S} \end{array} \right] ; \left[ \begin{array}{l} a_k = \frac{x_i y_j - x_j y_i}{2S} \\ b_k = \frac{y_i - y_j}{2S} \\ c_k = \frac{x_j - x_i}{2S} \end{array} \right] \quad (7.18)$$

Необходимо отметить, что коэффициенты  $a_i, a_j, a_k$  как правило, в расчете не участвуют.

В п. 7.2 говорилось, что температура в элементе может быть представлена как произведение функций формы на значение температуры в узлах:

$$u^{(m)}(x, y) = u_i F_i^{(m)}(x, y) + u_j F_j^{(m)}(x, y) + u_k F_k^{(m)}(x, y) \quad (7.19)$$

Исходя из этого выражения и формулы (7.14), запишем выражение для производных от температуры по координатам:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial x} &= b_i u_i + b_j u_j + b_k u_k \\ \frac{\partial u}{\partial y} &= c_i u_i + c_j u_j + c_k u_k\end{aligned}\tag{7.20}$$

Как видно из этого выражения, значение производных по координатам, а, следовательно, и градиента температуры в каждом элементе постоянно.

Теперь приведём некоторые свойства функций формы, которые будут использованы нами в дальнейшем:

Интеграл от любой функции формы по площади элемента равен 1/3 площади элемента:

$$\iint_{S_m} F_n^{(m)}(x, y) dx dy = \frac{S^{(m)}}{3}; \quad n = i, j, k\tag{7.21}$$

Интегралы по стороне  $L_{ij}$  вычисляются по следующим формулам:

$$\int_{L_{ij}} F_i(x, y) dl = \frac{L_{ij}}{2}; \quad \int_{L_{ij}} F_i^2(x, y) dl = \frac{L_{ij}}{3}; \quad \int_{L_{ij}} F_i(x, y) F_j(x, y) dl = \frac{L_{ij}}{6}\tag{7.22}$$

## 7.4 Система уравнений МКЭ

Исходя из выбранного способа представления температуры (7.10), функционал (7.9) можно представить как сумму функционалов по всем элементам:

$$I = \sum_{m=1}^M I^{(m)}\tag{7.23}$$

$$I^{(m)} = \iint_{S^{(m)}} \left[ \lambda_x \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \lambda_y \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 - 2Q_V u \right] dx dy + \int_{L^{(m)}} (c u^2 - 2q_w u) dl\tag{7.24}$$

Второй интеграл в (7.24) вычисляется только для граничных элементов.

Окончательное условие минимума полученного функционала с учётом (7.13) может быть представлено в виде:

$$\frac{\partial}{\partial u_n} \left( \sum_{m=1}^M I^{(m)} \right) = \sum_{m=1}^M \frac{\partial I^{(m)}}{\partial u_n} = 0, n = 1, \dots, N \quad (7.25)$$

Заметим, что значение функционала  $I^{(m)}$  в любом элементе зависит только от температуры в узлах этого элемента. Соответственно в выражении (7.25) отличны от нуля будут производные от  $I^{(m)}$  по  $u_n$  лишь тех элементов, которые включают в себя узел  $n$ .

Это обстоятельство позволяет подойти к проблеме формирования системы уравнений МКЭ двумя способами.

**Первый способ** заключается в переборе узлов. Поочерёдно выбирается каждый узел и определяется, в какие элементы он входит. Затем записывается и приравнивается нулю сумма частных производных по температуре в данном узле от функционалов соответствующих элементов. Так одно за другим формируются  $N$  уравнений системы МКЭ.

**Второй способ** основан на переборе элементов. Рассматривается каждый элемент, определяется, какие узлы в него входят, после чего производные от функционала этого элемента по температурам в данных узлах заносятся в соответствующие уравнения системы МКЭ.

Второй способ получил более широкое распространение и легче программируется, хотя при этом он менее нагляден. В дальнейшем мы на несложном примере рассмотрим оба способа.

Теперь получим явные выражения для производной от функционала по температуре в узле  $i$ .

$$\begin{aligned}
\frac{\partial I^{(m)}}{\partial u_i} &= \frac{\partial}{\partial u_i} \left[ \iint_{S^{(m)}} \left[ \lambda_x \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \lambda_y \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 - 2Q_V u \right] dx dy + \int_{l^{(m)}} (\alpha u^2 - 2q_w u) dl \right] = \\
&= \iint_{S^{(m)}} \left[ \frac{\partial}{\partial u_i} \left[ \lambda_x \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right] + \frac{\partial}{\partial u_i} \left[ \lambda_y \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 \right] - \frac{\partial}{\partial u_i} (2Q_V u) \right] dx dy + \\
&+ \int_{l^{(m)}} \left( \frac{\partial}{\partial u_i} (\alpha u^2) - \frac{\partial}{\partial u_i} (2q_w u) \right) dl
\end{aligned} \tag{7.26}$$

Здесь мы воспользовались тем фактом, что производную от интеграла можно взять, продифференцировав подынтегральное выражение.

Воспользовавшись формулами (7.20), получим значения для каждой производной в выражении (7.26):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial u_i} \left[ \lambda_x \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right] &= 2(b_i u_i + b_j u_j + b_k u_k) b_i \\
\frac{\partial}{\partial u_i} \left[ \lambda_y \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 \right] &= 2(c_i u_i + c_j u_j + c_k u_k) c_i \\
\frac{\partial}{\partial u_i} (2Q_V u) &= 2Q_V F_i(x, y) \\
\frac{\partial}{\partial u_i} (2q_w u) &= 2q_w F_i \\
\frac{\partial}{\partial u_i} (\alpha u^2) &= 2\alpha (F_i u_i + F_j u_j + F_k u_k) F_i
\end{aligned} \tag{7.27}$$

Подставляя (7.27) в (7.26) и используя формулы (7.21) и (7.22), после преобразований получим следующие выражения для интегралов, входящих в него:

$$\iint_{S^{(m)}} \left[ \lambda_x \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \lambda_y \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 - 2Q_V u \right] dx dy = \quad (7.28)$$

$$= 2S^{(n)} \left[ \lambda_x (b_i b_i u_i + b_i b_j u_j + b_i b_k u_k) + \lambda_y (c_i c_i u_i + c_i c_j u_j + c_i c_k u_k) - \frac{Q_V}{3} \right]$$

$$\int_{L^{(m)}} (\alpha u^2 - 2q_w u) dl = 2L_{ij} \left( \frac{\alpha u_i}{3} + \frac{\alpha u_j}{6} - \frac{q_w}{2} \right) \quad (7.29)$$

Таким образом, формула (7.26) приобретает вид:

$$\frac{\partial I^{(m)}}{\partial u_i} = 2S^{(n)} \left[ \lambda_x (b_i b_i u_i + b_i b_j u_j + b_i b_k u_k) + \lambda_y (c_i c_i u_i + c_i c_j u_j + c_i c_k u_k) - \frac{Q_V}{3} \right] + \quad (7.30)$$

$$+ 2L_{ij} \left( \frac{\alpha u_i}{3} + \frac{\alpha u_j}{6} - \frac{q_w}{2} \right)$$

Для формирования системы уравнений удобно записать полученные выше соотношения в матричной форме. Для получения матричной записи принято использовать так называемую локальную нумерацию узлов и соответствующих им температур.

Рассмотрим треугольный элемент номер  $p$ , имеющий точки с глобальными номерами  $i, j, k$ , и будем условно считать узел  $i$  – первым,  $j$  – вторым,  $k$  – третьим:

$$u_i = u_1^{(p)}; u_j = u_2^{(p)}; u_k = u_3^{(p)} \quad (7.31)$$

Для принятой системы нумерации выражение для частных производных от функционала элемента примет вид:

$$\left\| \frac{\partial I^{(p)}}{\partial u} \right\| = \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{U}^{(p)} - \phi^{(p)} \quad (7.32)$$

Здесь под  $\left\| \frac{\partial I^{(p)}}{\partial u} \right\|$  понимается вектор-столбец вида:

$$\left\| \frac{\partial I^{(p)}}{\partial u} \right\| = \frac{\left( \frac{\partial I^{(p)}}{\partial u_i} \right)}{\left( \frac{\partial I^{(p)}}{\partial u_j} \right)} = \frac{\left( \frac{\partial I^{(p)}}{\partial u_1^{(p)}} \right)}{\left( \frac{\partial I^{(p)}}{\partial u_2^{(p)}} \right)} = \frac{\left( \frac{\partial I^{(p)}}{\partial u_k} \right)}{\left( \frac{\partial I^{(p)}}{\partial u_3^{(p)}} \right)} \quad (7.33)$$

$\mathbf{g}^{(p)}$  – локальная матрица теплопроводности.

$$\mathbf{g}^{(p)} = \begin{pmatrix} g_{ii} & g_{ij} & g_{ik} \\ g_{ji} & g_{jj} & g_{jk} \\ g_{ki} & g_{kj} & g_{kk} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_{11}^{(p)} & g_{12}^{(p)} & g_{13}^{(p)} \\ g_{21}^{(p)} & g_{22}^{(p)} & g_{23}^{(p)} \\ g_{31}^{(p)} & g_{32}^{(p)} & g_{33}^{(p)} \end{pmatrix} \quad (7.34)$$

В общем виде, при отсутствии на гранях элемента какого-либо теплового потока её можно представить в виде:

$$\mathbf{g}^{(p)} = \lambda_x \cdot S^{(p)} \cdot \begin{pmatrix} b_i b_i & b_i b_j & b_i b_k \\ b_j b_i & b_j b_j & b_j b_k \\ b_k b_i & b_k b_j & b_k b_k \end{pmatrix} + \lambda_y \cdot S^{(p)} \cdot \begin{pmatrix} c_i c_i & c_i c_j & c_i c_k \\ c_j c_i & c_j c_j & c_j c_k \\ c_k c_i & c_k c_j & c_k c_k \end{pmatrix} \quad (7.35)$$

$\phi^{(p)}$  – вектор тепловой нагрузки.

$$\phi^{(p)} = \begin{pmatrix} \phi_i \\ \phi_j \\ \phi_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_1^{(p)} \\ \phi_2^{(p)} \\ \phi_3^{(p)} \end{pmatrix}$$

Вектор тепловой нагрузки включает в себя тепловые воздействия, оказываемые на тело (тепловые потоки на границе, внутреннее тепловыделение и т.п.).

Если бы тело состояло всего лишь из одного элемента, то вся система уравнений метода конечных элементов могла бы быть записана в виде:

$$\mathbf{g}^{(1)} \mathbf{U}^{(1)} = \phi^{(1)} \quad (7.37)$$

В реальных случаях такое крупное разбиение, естественно, не приемлемо. Когда элементов много, вся система уравнений представляется в виде:

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{U} = \mathbf{\Phi} \quad (7.38)$$

где  $\mathbf{\Phi}$  – глобальный вектор тепловой нагрузки,  $\mathbf{G}$  – глобальная матрица теплопроводности, а  $\mathbf{U}$  – вектор-столбец, состоящий из температур в узлах элементов.

Система уравнений (7.38) решается каким-либо методом решения систем линейных алгебраических уравнений (например, методом исключения Гаусса, или методом итераций).

В Приложении 1 представлен подробный разбор решения методом конечных элементов задачи теплопроводности в твёрдом теле со сложными условиями теплообмена.



# Приложение 1. Расчёт двумерной задачи теплопроводности методом конечных элементов

## П.1. Постановка задачи

В качестве примера рассмотрим стационарную задачу нахождения температурного поля в бруске квадратного сечения с учетом наличия объемного тепловыделения и сложными граничными условиями.

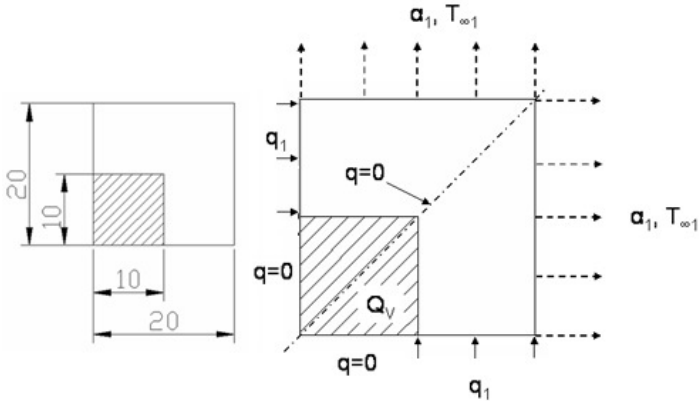


Рисунок П.0.1 Постановка задачи

Уравнение теплопроводности в сплошной среде будет иметь вид:

$$\lambda_x \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \lambda_y \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + Q_V = 0$$

Разобьем расчетную область с помощью треугольных элементов.

Основными этапами решения данной задачи являются:

Локальная нумерация узлов

Расчет коэффициентов функции формы для каждого элемента

Запись и расчет локальной матрицы теплопроводности и локального вектора тепловой нагрузки для каждого элемента

Запись системы уравнений метода конечных элементов

Решение системы уравнений метода конечных элементов

Рассмотрим каждый из этих этапов.

## П.2. Локальная нумерация узлов

Проведем локальную нумерацию элементов, то есть, определим  $i, j, k$  - узлы для каждого элемента. Рекомендуется использовать обход против часовой стрелки для всех элементов. После этого запишем локальные матрицы теплопроводности (ЛМТ) и локальные вектора тепловой нагрузки (ЛВТН) для каждого элемента.

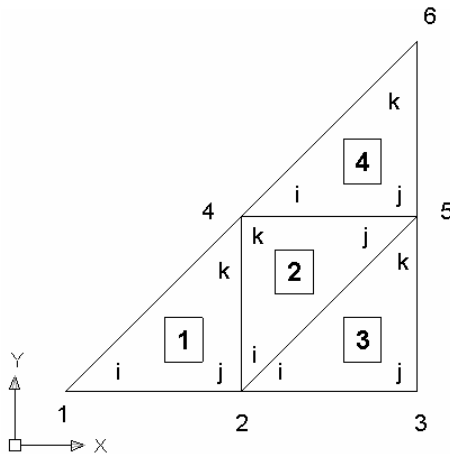


Рисунок П.0.2 Нумерация узлов

Запись локальной матрицы теплопроводности и локального вектора тепловой нагрузки.

Локальная матрица теплопроводности (ЛМТ) в общем виде:

$$g = \begin{pmatrix} g_{ii} & g_{ij} & g_{ik} \\ g_{ji} & g_{jj} & g_{jk} \\ g_{ki} & g_{kj} & g_{kk} \end{pmatrix}$$

Локальный вектор тепловой нагрузки (ЛВТН) в общем виде:

$$\varphi = \begin{pmatrix} \varphi_i \\ \varphi_j \\ \varphi_k \end{pmatrix}$$

Рассмотрим общий случай, когда на всех гранях приложен конвективный теплообмен, а так же есть объемное тепловыделение. Кроме того, рассмотрим случай, когда на гранях заданы тепловые потоки.

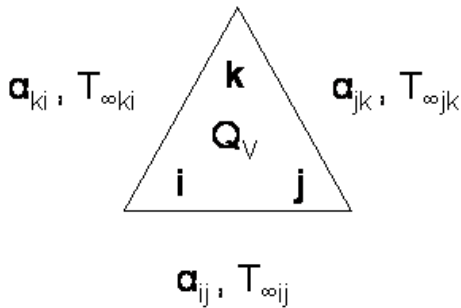


Рисунок П.0.3 Элемент с конвективным теплообменом на границе и объёмным тепловыделением

ЛВТН в случае, когда заданы тепловые потоки на поверхности элемента :

$$\varphi^n = \frac{Q_V}{3} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{q_{ij} \cdot L_{ij}}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{q_{jk} \cdot L_{jk}}{2} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{q_{ki} \cdot L_{ki}}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Если в элементе нет объемного тепловыделения  $Q_V = 0$ , то

$$\varphi^n = \begin{pmatrix} \varphi_i \\ \varphi_j \\ \varphi_k \end{pmatrix} = \frac{q_{ij} \cdot L_{ij}}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{q_{jk} \cdot L_{jk}}{2} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{q_{ki} \cdot L_{ki}}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Отметим, что справедлива следующая замена:

$$T_{\infty ij} \cdot \alpha_{ij} = q_{ij}, \quad T_{\infty jk} \cdot \alpha_{jk} = q_{jk}, \quad T_{\infty ki} \cdot \alpha_{ki} = q_{ki}$$

Таким образом, мы получаем выражения для ЛВТН для конвективного теплообмена аналогичные формулам, приведённым выше.

$$\varphi^n = \frac{Q_V}{3} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{T_{\infty ij} \cdot \alpha_{ij} \cdot L_{ij}}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{T_{\infty jk} \cdot \alpha_{jk} \cdot L_{jk}}{2} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{T_{\infty ki} \cdot \alpha_{ki} \cdot L_{ki}}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\varphi^n = \frac{T_{\infty ij} \cdot \alpha_{ij} \cdot L_{ij}}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{T_{\infty jk} \cdot \alpha_{jk} \cdot L_{jk}}{2} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{T_{\infty ki} \cdot \alpha_{ki} \cdot L_{ki}}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

ЛМТ при наличии на каждой грани элемента конвективного теплообмена:

$$g = \lambda_x \cdot S \cdot \begin{pmatrix} b_i b_i & b_i b_j & b_i b_k \\ b_j b_i & b_j b_j & b_j b_k \\ b_k b_i & b_k b_j & b_k b_k \end{pmatrix} + \lambda_y \cdot S \cdot \begin{pmatrix} c_i c_i & c_i c_j & c_i c_k \\ c_j c_i & c_j c_j & c_j c_k \\ c_k c_i & c_k c_j & c_k c_k \end{pmatrix} + \\ + \frac{\alpha_{ij} \cdot L_{ij}}{6} \cdot \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{\alpha_{jk} \cdot L_{jk}}{6} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} + \frac{\alpha_{ki} \cdot L_{ki}}{6} \cdot \begin{pmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

ЛМТ при отсутствии на каждой грани элемента теплового конвективного теплообмена:

$$g = \lambda_x \cdot S \cdot \begin{pmatrix} b_i b_i & b_i b_j & b_i b_k \\ b_j b_i & b_j b_j & b_j b_k \\ b_k b_i & b_k b_j & b_k b_k \end{pmatrix} + \lambda_y \cdot S \cdot \begin{pmatrix} c_i c_i & c_i c_j & c_i c_k \\ c_j c_i & c_j c_j & c_j c_k \\ c_k c_i & c_k c_j & c_k c_k \end{pmatrix}$$

Запишем ЛМТ и ЛВТН для каждого элемента рассматриваемой задачи.

В элементе №1 присутствует объемное тепловыделение и отсутствуют на гранях конвективный теплообмен и тепловой поток. ЛМТ для элемента №1:

$$g^1 = \lambda_x \cdot S^1 \cdot \begin{pmatrix} b_i b_i & b_i b_j & b_i b_k \\ b_j b_i & b_j b_j & b_j b_k \\ b_k b_i & b_k b_j & b_k b_k \end{pmatrix} + \lambda_y \cdot S^1 \cdot \begin{pmatrix} c_i c_i & c_i c_j & c_i c_k \\ c_j c_i & c_j c_j & c_j c_k \\ c_k c_i & c_k c_j & c_k c_k \end{pmatrix}$$

ЛВТН для элемента №1:

$$\varphi^1 = \frac{Q_V}{3} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

В элементе №2 отсутствует объемное тепловыделение внутри элемента, и отсутствуют на гранях конвективный теплообмен и тепловой поток. ЛМТ для элемента №2:

$$g^2 = \lambda_x \cdot S^2 \cdot \begin{pmatrix} b_i b_i & b_i b_j & b_i b_k \\ b_j b_i & b_j b_j & b_j b_k \\ b_k b_i & b_k b_j & b_k b_k \end{pmatrix} + \lambda_y \cdot S^2 \cdot \begin{pmatrix} c_i c_i & c_i c_j & c_i c_k \\ c_j c_i & c_j c_j & c_j c_k \\ c_k c_i & c_k c_j & c_k c_k \end{pmatrix}$$

ЛВТН для элемента №2:

$$\varphi^2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

В элементе №3 отсутствует объемное тепловыделение внутри элемента, на грани ij присутствует тепловой поток  $q_1$  а на грани jk – конвективный теплообмен с коэффициентом теплоотдачи  $\alpha_1$  и температурой потока  $T_{\infty 1}$ . ЛМТ для элемента №3:

$$g^3 = \lambda_x \cdot S^3 \cdot \begin{pmatrix} b_i b_i & b_i b_j & b_i b_k \\ b_j b_i & b_j b_j & b_j b_k \\ b_k b_i & b_k b_j & b_k b_k \end{pmatrix} + \lambda_y \cdot S^3 \cdot \begin{pmatrix} c_i c_i & c_i c_j & c_i c_k \\ c_j c_i & c_j c_j & c_j c_k \\ c_k c_i & c_k c_j & c_k c_k \end{pmatrix} + \frac{\alpha_1 \cdot L_{jk}}{6} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

ЛВТН для элемента №3:

$$\varphi^3 = \frac{q_1 \cdot L_{ij}}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{T_{\infty 1} \cdot \alpha_1 \cdot L_{jk}}{2} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

В элементе №4 отсутствует объемное тепловыделение внутри элемента, отсутствуют тепловые потоки на гранях, а на грани jk – конвективный теплообмен с коэффициентом теплоотдачи  $\alpha_1$  и температурой потока  $T_{\infty 1}$ .

ЛМТ для элемента №4:

$$g^4 = \lambda_x \cdot S^4 \cdot \begin{pmatrix} b_i b_i & b_i b_j & b_i b_k \\ b_j b_i & b_j b_j & b_j b_k \\ b_k b_i & b_k b_j & b_k b_k \end{pmatrix} + \lambda_y \cdot S^4 \cdot \begin{pmatrix} c_i c_i & c_i c_j & c_i c_k \\ c_j c_i & c_j c_j & c_j c_k \\ c_k c_i & c_k c_j & c_k c_k \end{pmatrix} + \frac{\alpha_1 \cdot L_{jk}}{6} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

ЛВТН для элемента №4:

$$\varphi^4 = \frac{T_{\infty 1} \cdot \alpha_1 \cdot L_{jk}}{2} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Необходимо помнить, что площади S и коэффициенты b и c должны быть рассчитаны для каждого элемента.

### П.3. Составление системы уравнений метода конечных элементов

Систему уравнений метода конечных элементов (СУ МКЭ) можно записать в виде:

$$G \cdot U = \Phi$$

где  $\Phi$  - глобальный вектор тепловой нагрузки

$$\Phi = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \dots \\ \varphi_m \end{pmatrix}$$

$U$  – значение температур в точках

$$U = \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ \dots \\ U_m \end{pmatrix}$$

$G$  – глобальная матрица теплопроводности

$$G = \left\| G_{ij} \right\|$$

Формирование СУ МКЭ может осуществляться двумя методами: перебора узлов и перебора элементов. Рассмотрим каждый из них.

#### Метод перебора узлов.

Выбирается узел, например  $n$ , выявляются в какие элементы он входит, и записываются уравнения для этих элементов. Таким образом, сразу удастся записать уравнение  $n$  СУ МКЭ.

Для элементов глобальной матрицы теплопроводности введем следующие обозначения:

$g_{\text{номер\_элемента}}^{\text{номер\_в\_локальной\_матрице}}$

Для элементов глобального вектора тепловой нагрузки введем следующие обозначения:

$\varphi_{\text{номер\_в\_локальной\_матрице}}^{\text{номер\_элемента}}$

Запишем таблицу, в которой будем формировать СУ МКЭ:

	$U_1$	$U_2$	$U_3$	$U_4$	$U_5$	$U_6$	$\Phi$
1							
2							
3							
4							
5							
6							

Возьмем узел №1 и запишем первое уравнение СУ МКЭ. Номер уравнения СУ МКЭ всегда будет соответствовать номеру выбранного узла.

Узел №1 входит в элемент номер №1. Этот элемент делает вклад в первое уравнение СУ МКЭ первой строкой (индекс строки в ЛМТ -  $i$ ) ЛМТ в столбцы, соответствующие номерам узлов (узлы 1, 2, 4). ЛВТН делает вклад первым элементом в СУ МКЭ. Первое уравнение запишется следующим образом:



	U <sub>1</sub>	U <sub>2</sub>	U <sub>3</sub>	U <sub>4</sub>	U <sub>5</sub>	U <sub>6</sub>	Φ
1	$g_{ii}^1$	$g_{ij}^1$		$g_{ik}^1$			$\phi_i^1$
2							
3							
4							
5							
6							

Узел №2 входит в элементы №1, №2, №3. Элемент №1 делает вклад во второе уравнение второй строкой (индекс строки в ЛМТ - j) ЛМТ. Элемент №2 делает вклад во второе уравнение элементами первой строки (индекс строки в ЛМТ - i) ЛМТ. Элемент №3 делает вклад во второе уравнение первой строкой (индекс строки в ЛМТ - i):

	U <sub>1</sub>	U <sub>2</sub>	U <sub>3</sub>	U <sub>4</sub>	U <sub>5</sub>	U <sub>6</sub>	Φ
1	$g_{ii}^1$	$g_{ij}^1$		$g_{ik}^1$			$\phi_i^1$
2	$g_{ji}^1$	$g_{jj}^1 + g_{ii}^2 + g_{ii}^3$	$g_{ij}^3$	$g_{jk}^1 + g_{ik}^2$	$g_{ij}^2 + g_{ik}^3$		$\phi_j^1 +$ $\phi_i^2 +$ $\phi_i^3$
3							
4							
5							
6							

Узел №3 входит в элемент №3. Этот элемент делает вклад второй строкой (индекс строки в ЛМТ - j) индекс строки в ЛМТ в третье уравнение СУ МКЭ:

	U <sub>1</sub>	U <sub>2</sub>	U <sub>3</sub>	U <sub>4</sub>	U <sub>5</sub>	U <sub>6</sub>	Φ
1	$g_{ii}^1$	$g_{ij}^1$		$g_{ik}^1$			$\varphi_i^1$
2	$g_{ji}^1$	$g_{jj}^1 + g_{ii}^2 + g_{ii}^3$	$g_{ij}^3$	$g_{jk}^1 + g_{ik}^2$	$g_{ij}^2 + g_{ik}^3$		$\varphi_j^1 + \varphi_i^2 + \varphi_i^3$
3		$g_{ji}^3$	$g_{jj}^3$		$g_{jk}^3$		$\varphi_j^3$
4							
5							
6							

Узел №4 входит в элементы №1, №2, №4. Элемент №1 делает вклад третьей строкой (индекс строки в ЛМТ - k) ЛМТ в четвертое уравнение СУ МКЭ. Элемент №2 делает вклад третьей строкой (индекс строки в ЛМТ - k) ЛМТ. Элемент №4 делает вклад первой строкой (индекс строки в ЛМТ - i) ЛМТ:

	U <sub>1</sub>	U <sub>2</sub>	U <sub>3</sub>	U <sub>4</sub>	U <sub>5</sub>	U <sub>6</sub>	Φ
1	$g_{ii}^1$	$g_{ij}^1$		$g_{ik}^1$			$\varphi_i^1$
2	$g_{ji}^1$	$g_{jj}^1 + g_{ii}^2 + g_{ii}^3$	$g_{ij}^3$	$g_{jk}^1 + g_{ik}^2$	$g_{ij}^2 + g_{ik}^3$		$\varphi_j^1 + \varphi_i^2 + \varphi_i^3$
3		$g_{ji}^3$	$g_{jj}^3$		$g_{jk}^3$		$\varphi_j^3$
4	$g_{ki}^1$	$g_{kj}^1 + g_{ki}^2$		$g_{kk}^1 + g_{kk}^2 + g_{ii}^4$	$g_{kj}^2 + g_{ij}^4$	$g_{ik}^4$	$\varphi_k^1 + \varphi_k^2$

							$+ \varphi_i^4$
5							
6							

Узел №5 входит в элементы №2, №3, №4. Элемент №2 делает вклад второй строкой (индекс строки в ЛМТ - j) ЛМТ в СУ МКЭ. Элемент №3 делает вклад третьей строкой (индекс строки в ЛМТ - k) ЛМТ. Элемент №4 делает вклад второй строкой (индекс строки в ЛМТ - j) ЛМТ:

	$U_1$	$U_2$	$U_3$	$U_4$	$U_5$	$U_6$	$\Phi$
1	$g_{ii}^1$	$g_{ij}^1$		$g_{ik}^1$			$\varphi_i^1$
2	$g_{ji}^1$	$g_{jj}^1 + g_{ii}^2 + g_{ii}^3$	$g_{ij}^3$	$g_{jk}^1 +$ $g_{ik}^2$	$g_{ij}^2 + g_{ik}^3$		$\varphi_j^1 +$ $\varphi_i^2 +$ $\varphi_i^3$
3		$g_{ji}^3$	$g_{jj}^3$		$g_{jk}^3$		$\varphi_j^3$
4	$g_{ki}^1$	$g_{kj}^1 + g_{ki}^2$		$g_{kk}^1 +$ $g_{kk}^2 +$ $g_{ii}^4$	$g_{kj}^2 + g_{ij}^4$	$g_{ik}^4$	$\varphi_k^1 +$ $\varphi_k^2 +$ $\varphi_i^4$
5		$g_{ji}^2 + g_{ki}^3$	$g_{kj}^3$	$g_{jk}^2 +$ $g_{ji}^4$	$g_{jj}^2 + g_{kk}^3 +$ $g_{jj}^4$	$g_{jk}^4$	$\varphi_j^2 +$ $\varphi_k^3 +$ $\varphi_j^4$
6							

Узел №6 входит в элемент №4. Этот элемент делает вклад третьей строкой (индекс строки в ЛМТ - k) ЛМТ:

	$U_1$	$U_2$	$U_3$	$U_4$	$U_5$	$U_6$	$\Phi$
1	$g_{ii}^1$	$g_{ij}^1$		$g_{ik}^1$			$\varphi_i^1$
2	$g_{ji}^1$	$g_{jj}^1 +$ $g_{ii}^2 + g_{ii}^3$	$g_{ij}^3$	$g_{jk}^1 + g_{ik}^2$	$g_{ij}^2 + g_{ik}^3$		$\varphi_j^1 + \varphi_i^2 +$ $\varphi_i^3$
3		$g_{ji}^3$	$g_{jj}^3$		$g_{jk}^3$		$\varphi_j^3$
4	$g_{ki}^1$	$g_{kj}^1 +$ $g_{ki}^2$		$g_{kk}^1 + g_{kk}^2$ $+ g_{ii}^4$	$g_{kj}^2 + g_{ij}^4$	$g_{ik}^4$	$\varphi_k^1 + \varphi_i^2 +$ $\varphi_i^4$
5		$g_{ji}^2 +$ $g_{ki}^3$	$g_{kj}^3$	$g_{jk}^2 + g_{ji}^4$	$g_{jj}^2 + g_{kk}^3$ $+ g_{jj}^4$	$g_{jk}^4$	$\varphi_j^2 + \varphi_k^3 +$ $\varphi_j^4$
6				$g_{ki}^4$	$g_{kj}^4$	$g_{kk}^4$	$\varphi_k^4$

Таким образом, мы сформировали СУ МКЭ

### Метод перебора элементов

Метод перебора элементов заключается в том, что берется элемент и определяется, какими частями ЛМТ в какие уравнение он делает вклад. Для составления СУ МКЭ методом перебора элементов необходимо также произвести обход элементов и записать ЛМТ и ЛВТН как и в рассмотренном случае с методом перебора узлов.

Возьмем элемент №1 Он делает вклад в первое уравнение  $i$  – строкой ЛМТ ( $i$  – локальный номер узла №1) в столбцы 1, 2, 4 (номера узлов, входящих в элемент №1 ) и  $i$  – м элементом ЛВТН. Узел №2 является узлом  $j$  в элементе №1, потому он делает вклад во второе уравнение (номер уравнения будет совпадать с номером узла)  $j$  – строкой ЛМТ в столбцы 1, 2, 4. Узел №4 является узлом  $k$  элемента №1, поэтому он сделает вклад  $k$  – й строкой в столбцы 1, 2, 4. Элементы  $j$  и  $k$  вектора тепловой нагрузки соответственно запишутся во второе и четвертое уравнение.

	$U_1$	$U_2$	$U_3$	$U_4$	$U_5$	$U_6$	$\Phi$
1	$g_{ii}^1$	$g_{ij}^1$		$g_{ik}^1$			$\phi_i^1$
2	$g_{ji}^1$	$g_{jj}^1$		$g_{jk}^1$			$\phi_j^1$
3							
4	$g_{ki}^1$	$g_{kj}^1$		$g_{kk}^1$			$\phi_k^1$
5							
6							

Элемент №2 сделает вклад в столбцы 2, 4, 5 (номера узлов, составляющих элемент №2) строками  $i, k, j$  ЛМТ а также  $i, k, j$  – компонентами ЛВТН в уравнения 2, 4, 5 соответственно.

	U <sub>1</sub>	U <sub>2</sub>	U <sub>3</sub>	U <sub>4</sub>	U <sub>5</sub>	U <sub>6</sub>	Φ
1	$g_{ii}^1$	$g_{ij}^1$		$g_{ik}^1$			$\varphi_i^1$
2	$g_{ji}^1$	$g_{jj}^1 + g_{ii}^2$		$g_{jk}^1 + g_{ik}^2$	$g_{ij}^2$		$\varphi_j^1 + \varphi_i^2$
3							
4	$g_{ki}^1$	$g_{kj}^1 + g_{ki}^2$		$g_{kk}^1 + g_{kk}^2$	$g_{kj}^2$		$\varphi_k^1 + \varphi_k^2$
5		$g_{ji}^2$		$g_{jk}^2$	$g_{jj}^2$		$\varphi_j^2$
6							

Элемент №3 делает вклад во 2, 3 и 5 – е уравнения СУ МКЭ в столбцы 2, 3, 5 строками i, j, k ЛМТ и i, j, k – компонентами вектора тепловой нагрузки соответственно.

	U <sub>1</sub>	U <sub>2</sub>	U <sub>3</sub>	U <sub>4</sub>	U <sub>5</sub>	U <sub>6</sub>	Φ
1	$g_{ii}^1$	$g_{ij}^1$		$g_{ik}^1$			$\varphi_i^1$
2	$g_{ji}^1$	$g_{jj}^1 + g_{ii}^2 + g_{ii}^3$	$g_{ij}^3$	$g_{jk}^1 + g_{ik}^2$	$g_{ij}^2 + g_{ik}^3$		$\varphi_j^1 + \varphi_i^2 +$ $\varphi_i^3$
3		$g_{ji}^3$	$g_{jj}^3$		$g_{jk}^3$		$\varphi_j^3$
4	$g_{ki}^1$	$g_{kj}^1 + g_{ki}^2$		$g_{kk}^1 + g_{kk}^2$	$g_{kj}^2$		$\varphi_k^1 + \varphi_k^2$
5		$g_{ji}^2 + g_{ki}^3$	$g_{kj}^3$	$g_{jk}^2$	$g_{jj}^2 + g_{kk}^3$		$\varphi_j^2 + \varphi_k^3$
6							

Элемент №4 делает вклад в уравнения 4, 5, 6 в столбцы 4, 5, 6 строками i, j, k ЛМТ и i, j, k – компонентами вектора тепловой нагрузки соответственно.

	$U_1$	$U_2$	$U_3$	$U_4$	$U_5$	$U_6$	$\Phi$
1	$g_{ii}^1$	$g_{ij}^1$		$g_{ik}^1$			$\varphi_i^1$
2	$g_{ji}^1$	$g_{ij}^1 + g_{ii}^2 + g_{ii}^3$	$g_{ij}^3$	$g_{jk}^1 +$ $g_{ik}^2$	$g_{ij}^2 + g_{ik}^3$		$\varphi_j^1 + \varphi_i^2 +$ $\varphi_i^3$
3		$g_{ji}^3$	$g_{jj}^3$		$g_{jk}^3$		$\varphi_j^3$
4	$g_{ki}^1$	$g_{kj}^1 + g_{ki}^2$		$g_{kk}^1 +$ $g_{kk}^2 + g_{ii}^4$	$g_{kj}^2 + g_{ij}^4$	$g_{ik}^4$	$\varphi_k^1 + \varphi_k^2 +$ $\varphi_i^4$
5		$g_{ji}^2 + g_{ki}^3$	$g_{kj}^3$	$g_{jk}^2 +$ $g_{ji}^4$	$g_{jj}^2 +$ $g_{kk}^3 +$ $g_{jj}^4$	$g_{jk}^4$	$\varphi_j^2 + \varphi_k^3 +$ $\varphi_j^4$
6				$g_{ki}^4$	$g_{kj}^4$	$g_{kk}^4$	$\varphi_k^4$

Записанная таким образом СУ МКЭ является идентичной той, что была сформирована методом перебора узлов.

Решение системы уравнений метода конечных элементов.

$$\begin{pmatrix}
 g_{ii}^1 & g_{ij}^1 & 0 & g_{ik}^1 & 0 & 0 \\
 g_{ji}^1 & g_{jj}^1 + g_{ii}^2 + g_{ii}^3 & g_{ij}^3 & g_{jk}^1 + g_{ik}^2 & g_{ij}^2 + g_{ik}^3 & 0 \\
 0 & g_{ji}^3 & g_{jj}^3 & 0 & g_{jk}^3 & 0 \\
 g_{ki}^1 & g_{kj}^1 + g_{ki}^2 & 0 & g_{kk}^1 + g_{kk}^2 + g_{ii}^4 & g_{kj}^2 + g_{ij}^4 & g_{ik}^4 \\
 0 & g_{ji}^2 + g_{ki}^3 & g_{kj}^3 & g_{jk}^2 + g_{ji}^4 & g_{jj}^2 + g_{kk}^3 + g_{jj}^4 & g_{jk}^4 \\
 0 & 0 & 0 & g_{ki}^4 & g_{kj}^4 & g_{kk}^4
 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ U_4 \\ U_5 \\ U_6 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \varphi_i^1 \\ \varphi_j^1 + \varphi_i^2 + \varphi_i^3 \\ \varphi_j^3 \\ \varphi_k^1 + \varphi_k^2 + \varphi_i^4 \\ \varphi_j^2 + \varphi_k^3 + \varphi_j^4 \\ \varphi_k^4 \end{pmatrix}$$

Решение СУ МКЭ можно осуществить методом исключения Гаусса, который включает в себя два этапа:

прямой ход

обратный ход

При прямом ходе матрица приводится к верхнему треугольному виду таким образом, что бы на главной диагонали стояли единицы. Обратным ходом получаем все неизвестные.



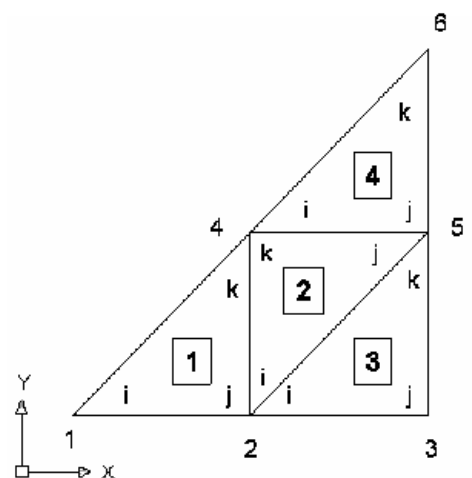
## П.4. Пример реализации расчета стационарного температурного поля методом конечных элементов

Рассмотрим пример расчета стационарного температурного поля для бруса, рассмотренного выше. Расчет будем производить с помощью инженерного пакета MathCad 11. Поверочный расчет произведем в конечно-элементном пакете ABAQUS v6.6-1 Student edition.

Теплопроводность в направлении x:	$\lambda_x := 20$	$\frac{\text{Вт}}{\text{м}\cdot\text{К}}$
Теплопроводность в направлении y:	$\lambda_y := 20$	$\frac{\text{Вт}}{\text{м}\cdot\text{К}}$
Коэффициент теплоотдачи:	$\alpha_1 := 250$	$\frac{\text{Вт}}{\text{м}^2\cdot\text{К}}$
Температура среды:	$T_{\text{оо1}} := 200 + 273$	К
Тепловой поток:	$q_1 := 10^4$	$\frac{\text{Вт}}{\text{м}^2}$
Объемное тепловыделение:	$Q_V := 10^5$	$\frac{\text{Вт}}{\text{м}^3}$

ORIGIN := 1

### Определение координат узлов



$x_1 := 0$	м	$y_1 := 0$	м
$x_2 := 10 \cdot 10^{-3}$	м	$y_2 := 0$	м
$x_3 := 20 \cdot 10^{-3}$	м	$y_3 := 0$	м
$x_4 := 10 \cdot 10^{-3}$	м	$y_4 := 10 \cdot 10^{-3}$	м
$x_5 := 20 \cdot 10^{-3}$	м	$y_5 := 10 \cdot 10^{-3}$	м
$x_6 := 20 \cdot 10^{-3}$	м	$y_6 := 20 \cdot 10^{-3}$	м

### Расчет длин сторон элементов

$$\begin{aligned}
 L_{ij1} &:= \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2} & L_{ij3} &:= \sqrt{(x_2 - x_3)^2 + (y_2 - y_3)^2} \\
 L_{jk1} &:= \sqrt{(x_2 - x_4)^2 + (y_2 - y_4)^2} & L_{jk3} &:= \sqrt{(x_3 - x_5)^2 + (y_3 - y_5)^2} \\
 L_{ki1} &:= \sqrt{(x_4 - x_1)^2 + (y_4 - y_1)^2} & L_{ki3} &:= \sqrt{(x_5 - x_2)^2 + (y_5 - y_2)^2} \\
 L_{ij2} &:= \sqrt{(x_2 - x_5)^2 + (y_2 - y_5)^2} & L_{ij4} &:= \sqrt{(x_4 - x_5)^2 + (y_4 - y_5)^2} \\
 L_{jk2} &:= \sqrt{(x_5 - x_4)^2 + (y_5 - y_4)^2} & L_{jk4} &:= \sqrt{(x_5 - x_6)^2 + (y_5 - y_6)^2} \\
 L_{ki2} &:= \sqrt{(x_4 - x_2)^2 + (y_4 - y_2)^2} & L_{ki4} &:= \sqrt{(x_6 - x_4)^2 + (y_6 - y_4)^2}
 \end{aligned}$$

$$L_{ij1} = 0.01 \quad \text{м} \quad L_{ij3} = 0.01 \quad \text{м}$$

$$L_{jk1} = 0.01 \quad \text{м} \quad L_{jk3} = 0.01 \quad \text{м}$$

$$L_{ki1} = 0.014 \quad \text{м} \quad L_{ki3} = 0.014 \quad \text{м}$$

$$L_{ij2} = 0.014 \quad \text{м} \quad L_{ij4} = 0.01 \quad \text{м}$$

$$L_{jk2} = 0.01 \quad \text{м} \quad L_{jk4} = 0.01 \quad \text{м}$$

$$L_{ki2} = 0.01 \quad \text{м} \quad L_{ki4} = 0.014 \quad \text{м}$$

Расчет площадей элементов

$$S_1 := \frac{x_2 \cdot y_4 - x_4 \cdot y_2 + y_2 \cdot x_1 - y_4 \cdot x_1 + x_4 \cdot y_1 - x_2 \cdot y_1}{2} \quad S_1 = 5 \times 10^{-5} \quad \text{м}^2$$

$$S_2 := \frac{x_5 \cdot y_4 - x_4 \cdot y_5 + y_5 \cdot x_2 - y_4 \cdot x_2 + x_4 \cdot y_2 - x_5 \cdot y_2}{2} \quad S_2 = 5 \times 10^{-5} \quad \text{м}^2$$

$$S_3 := \frac{x_3 \cdot y_5 - x_5 \cdot y_3 + y_3 \cdot x_2 - y_5 \cdot x_2 + x_5 \cdot y_2 - x_3 \cdot y_2}{2} \quad S_3 = 5 \times 10^{-5} \quad \text{м}^2$$

$$S_4 := \frac{x_5 \cdot y_6 - x_6 \cdot y_5 + y_5 \cdot x_4 - y_6 \cdot x_4 + x_6 \cdot y_4 - x_5 \cdot y_4}{2} \quad S_4 = 5 \times 10^{-5} \quad \text{м}^2$$

Расчет компонентов функции формы

$$b_{i1} := \frac{y_2 - y_4}{2 \cdot S_1} \quad c_{i1} := \frac{x_4 - x_2}{2 \cdot S_1} \quad b_{i1} = -100 \quad \frac{1}{M} \quad c_{i1} = 0 \quad \frac{1}{M}$$

$$b_{j1} := \frac{y_4 - y_1}{2S_1} \quad c_{j1} := \frac{x_1 - x_4}{2S_1} \quad b_{j1} = 100 \quad \frac{1}{M} \quad c_{j1} = -100 \quad \frac{1}{M}$$

$$b_{k1} := \frac{y_1 - y_2}{2S_1} \quad c_{k1} := \frac{x_2 - x_1}{2S_1} \quad b_{k1} = 0 \quad \frac{1}{M} \quad c_{k1} = 100 \quad \frac{1}{M}$$

$$b_{i2} := \frac{y_5 - y_4}{2S_2} \quad c_{i2} := \frac{x_4 - x_5}{2S_2} \quad b_{i2} = 0 \quad \frac{1}{M} \quad c_{i2} = -100 \quad \frac{1}{M}$$

$$b_{j2} := \frac{y_4 - y_2}{2S_2} \quad c_{j2} := \frac{x_2 - x_4}{2S_2} \quad b_{j2} = 100 \quad \frac{1}{M} \quad c_{j2} = 0 \quad \frac{1}{M}$$

$$b_{k2} := \frac{y_2 - y_5}{2S_2} \quad c_{k2} := \frac{x_5 - x_2}{2S_2} \quad b_{k2} = -100 \quad \frac{1}{M} \quad c_{k2} = 100 \quad \frac{1}{M}$$

$$b_{i3} := \frac{y_3 - y_5}{2S_3} \quad c_{i3} := \frac{x_5 - x_3}{2S_3} \quad b_{i3} = -100 \quad \frac{1}{M} \quad c_{i3} = 0 \quad \frac{1}{M}$$

$$b_{j3} := \frac{y_5 - y_2}{2S_3} \quad c_{j3} := \frac{x_2 - x_5}{2S_3} \quad b_{j3} = 100 \quad \frac{1}{M} \quad c_{j3} = -100 \quad \frac{1}{M}$$

$$b_{k3} := \frac{y_2 - y_3}{2S_3} \quad c_{k3} := \frac{x_3 - x_2}{2S_3} \quad b_{k3} = 0 \quad \frac{1}{M} \quad c_{k3} = 100 \quad \frac{1}{M}$$

$$b_{i4} := \frac{y_5 - y_6}{2S_4} \quad c_{i4} := \frac{x_6 - x_5}{2S_4} \quad b_{i4} = -100 \quad \frac{1}{M} \quad c_{i4} = 0 \quad \frac{1}{M}$$

$$b_{j4} := \frac{y_6 - y_4}{2S_4} \quad c_{j4} := \frac{x_4 - x_6}{2S_4} \quad b_{j4} = 100 \quad \frac{1}{M} \quad c_{j4} = -100 \quad \frac{1}{M}$$

$$b_{k4} := \frac{y_4 - y_5}{2S_4} \quad c_{k4} := \frac{x_5 - x_4}{2S_4} \quad b_{k4} = 0 \quad \frac{1}{M} \quad c_{k4} = 100 \quad \frac{1}{M}$$

Расчет ЛМТ и ЛВТН для элемента №1

$$g1 := \lambda_x \cdot S_1 \cdot \begin{pmatrix} b_{i1} \cdot b_{i1} & b_{i1} \cdot b_{j1} & b_{i1} \cdot b_{k1} \\ b_{j1} \cdot b_{i1} & b_{j1} \cdot b_{j1} & b_{j1} \cdot b_{k1} \\ b_{k1} \cdot b_{i1} & b_{k1} \cdot b_{j1} & b_{k1} \cdot b_{k1} \end{pmatrix} + \lambda_y \cdot S_1 \cdot \begin{pmatrix} c_{i1} \cdot c_{i1} & c_{i1} \cdot c_{j1} & c_{i1} \cdot c_{k1} \\ c_{j1} \cdot c_{i1} & c_{j1} \cdot c_{j1} & c_{j1} \cdot c_{k1} \\ c_{k1} \cdot c_{i1} & c_{k1} \cdot c_{j1} & c_{k1} \cdot c_{k1} \end{pmatrix}$$

$$g1 = \begin{pmatrix} 10 & -10 & 0 \\ -10 & 20 & -10 \\ 0 & -10 & 10 \end{pmatrix} \frac{\text{Br}}{\text{м} \cdot \text{К}}$$

$$\phi1 := \frac{Q_V \cdot S_1}{3} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \phi1 = \begin{pmatrix} 1.667 \\ 1.667 \\ 1.667 \end{pmatrix} \frac{\text{Br}}{\text{м}}$$

Расчет ЛМТ и ЛВТН для элемента №2

$$g2 := \lambda_x \cdot S_2 \cdot \begin{pmatrix} b_{i2} \cdot b_{i2} & b_{i2} \cdot b_{j2} & b_{i2} \cdot b_{k2} \\ b_{j2} \cdot b_{i2} & b_{j2} \cdot b_{j2} & b_{j2} \cdot b_{k2} \\ b_{k2} \cdot b_{i2} & b_{k2} \cdot b_{j2} & b_{k2} \cdot b_{k2} \end{pmatrix} + \lambda_y \cdot S_2 \cdot \begin{pmatrix} c_{i2} \cdot c_{i2} & c_{i2} \cdot c_{j2} & c_{i2} \cdot c_{k2} \\ c_{j2} \cdot c_{i2} & c_{j2} \cdot c_{j2} & c_{j2} \cdot c_{k2} \\ c_{k2} \cdot c_{i2} & c_{k2} \cdot c_{j2} & c_{k2} \cdot c_{k2} \end{pmatrix}$$

$$g2 = \begin{pmatrix} 10 & 0 & -10 \\ 0 & 10 & -10 \\ -10 & -10 & 20 \end{pmatrix} \frac{\text{Br}}{\text{м} \cdot \text{К}}$$

$$\phi2 := \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \phi2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \frac{\text{Br}}{\text{м}}$$

Расчет ЛМТ и ЛВТН для элемента №3

$$g_3 := \lambda_x \cdot S_3 \cdot \begin{pmatrix} b_{i3} \cdot b_{i3} & b_{i3} \cdot b_{j3} & b_{i3} \cdot b_{k3} \\ b_{j3} \cdot b_{i3} & b_{j3} \cdot b_{j3} & b_{j3} \cdot b_{k3} \\ b_{k3} \cdot b_{i3} & b_{k3} \cdot b_{j3} & b_{k3} \cdot b_{k3} \end{pmatrix} + \lambda_y \cdot S_3 \cdot \begin{pmatrix} c_{i3} \cdot c_{i3} & c_{i3} \cdot c_{j3} & c_{i3} \cdot c_{k3} \\ c_{j3} \cdot c_{i3} & c_{j3} \cdot c_{j3} & c_{j3} \cdot c_{k3} \\ c_{k3} \cdot c_{i3} & c_{k3} \cdot c_{j3} & c_{k3} \cdot c_{k3} \end{pmatrix} + \frac{\alpha_1 \cdot L_{jk3}}{6} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$g_3 = \begin{pmatrix} 10 & -10 & 0 \\ -10 & 20.833 & -9.583 \\ 0 & -9.583 & 10.833 \end{pmatrix} \quad \frac{\text{Br}}{\text{м} \cdot \text{К}}$$

$$\phi_3 := \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{\alpha_1 \cdot L_{ij3}}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{T_{001} \cdot \alpha_1 \cdot L_{jk3}}{2} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \phi_3 = \begin{pmatrix} 50 \\ 641.25 \\ 591.25 \end{pmatrix} \quad \frac{\text{Br}}{\text{м}}$$

Расчет ЛМТ и ЛВТН для элемента №4

$$g_4 := \lambda_x \cdot S_4 \cdot \begin{pmatrix} b_{i4} \cdot b_{i4} & b_{i4} \cdot b_{j4} & b_{i4} \cdot b_{k4} \\ b_{j4} \cdot b_{i4} & b_{j4} \cdot b_{j4} & b_{j4} \cdot b_{k4} \\ b_{k4} \cdot b_{i4} & b_{k4} \cdot b_{j4} & b_{k4} \cdot b_{k4} \end{pmatrix} + \lambda_y \cdot S_4 \cdot \begin{pmatrix} c_{i4} \cdot c_{i4} & c_{i4} \cdot c_{j4} & c_{i4} \cdot c_{k4} \\ c_{j4} \cdot c_{i4} & c_{j4} \cdot c_{j4} & c_{j4} \cdot c_{k4} \\ c_{k4} \cdot c_{i4} & c_{k4} \cdot c_{j4} & c_{k4} \cdot c_{k4} \end{pmatrix} + \frac{\alpha_1 \cdot L_{jk4}}{6} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$g_4 = \begin{pmatrix} 10 & -10 & 0 \\ -10 & 20.833 & -9.583 \\ 0 & -9.583 & 10.833 \end{pmatrix} \quad \frac{\text{Br}}{\text{м} \cdot \text{К}}$$

$$\phi_4 := \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{T_{001} \cdot \alpha_1 \cdot L_{jk4}}{2} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \phi_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 591.25 \\ 591.25 \end{pmatrix} \quad \frac{\text{Br}}{\text{м}}$$

Составление глобальной матрицы теплопроводности:

$$G := \begin{pmatrix} g_{1,1} & g_{1,2} & 0 & g_{1,3} & 0 & 0 \\ g_{2,1} & g_{2,2} + g_{2,1,1} + g_{3,1,1} & g_{3,1,2} & g_{2,3} + g_{2,1,3} & g_{2,1,2} + g_{3,1,3} & 0 \\ 0 & g_{3,2,1} & g_{3,2,2} & 0 & g_{3,2,3} & 0 \\ g_{3,1} & g_{3,2} + g_{2,3,1} & 0 & g_{3,3} + g_{2,3,3} + g_{4,1,1} & g_{3,2} + g_{4,1,2} & g_{4,1,3} \\ 0 & g_{2,1} + g_{3,3,1} & g_{3,3,2} & g_{2,3} + g_{4,2,1} & g_{2,2} + g_{3,3,3} + g_{4,2,2} & g_{4,2,3} \\ 0 & 0 & 0 & g_{4,3,1} & g_{4,3,2} & g_{4,3,3} \end{pmatrix}$$

$$G = \begin{pmatrix} 10 & -10 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -10 & 40 & -10 & -20 & 0 & 0 \\ 0 & -10 & 20.833 & 0 & -9.583 & 0 \\ 0 & -20 & 0 & 40 & -20 & 0 \\ 0 & 0 & -9.583 & -20 & 41.667 & -9.583 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -9.583 & 10.833 \end{pmatrix} \quad \frac{\text{Вт}}{\text{м}\cdot\text{К}}$$

Составление глобального вектора тепловой нагрузки:

$$\Phi := \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_1 + \phi_2 + \phi_3 \\ \phi_3 \\ \phi_1 + \phi_2 + \phi_4 \\ \phi_2 + \phi_3 + \phi_4 \\ \phi_4 \end{pmatrix} \quad \Phi = \begin{pmatrix} 1.667 \\ 51.667 \\ 641.25 \\ 1.667 \\ 1.183 \times 10^3 \\ 591.25 \end{pmatrix} \quad \frac{\text{Вт}}{\text{м}}$$

Решение СУ МКЭ

$$U := G^{-1} \cdot \Phi \quad U = \begin{pmatrix} 498.282 \\ 498.115 \\ 497.02 \\ 495.996 \\ 493.793 \\ 491.394 \end{pmatrix} \quad \text{К} \quad t := \begin{pmatrix} U_1 - 273 \\ U_2 - 273 \\ U_3 - 273 \\ U_4 - 273 \\ U_5 - 273 \\ U_6 - 273 \end{pmatrix} \quad t = \begin{pmatrix} 225.282 \\ 225.115 \\ 224.02 \\ 222.996 \\ 220.793 \\ 218.394 \end{pmatrix} \quad \text{оС}$$

Максимальная температура у узла №1 ( $t = 225 \text{ }^\circ\text{C}$ ), минимальная у узла №6 ( $t = 218 \text{ }^\circ\text{C}$ )

Результаты поверочного расчета:

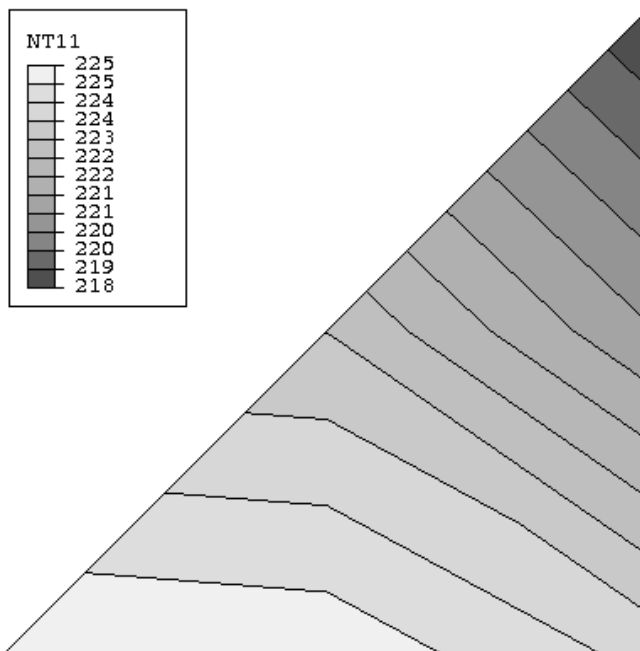


Рисунок П.0.4 Результаты поверочного расчёта температурного поля в ABAQUS v6.6-1 Student edition

То есть данные расчёта в современном конечно-элементном пакете полностью совпали с нашими выкладками.



## **Заключение**

При изучении данного пособия может возникнуть впечатление о некоторой его незавершённости и недосказанности. Однако, следует обратить внимание читателя, что это всего лишь вводный курс.

Проблемам вычислительной гидродинамики и теплообмена посвящены обширные труды и монографии. Здесь же была сделана попытка сделать обзор самых важных идей и изложить их на как можно более простом языке.

Существует множество CFD пакетов, но правильно и в полной мере ими может пользоваться лишь тот, кто обладает хотя бы начальными знаниями в области теории. В данном пособии как раз была сделана попытка дать этот минимум теоретических знаний. Именно поэтому мы не рассматривали вопросы лучистого теплообмена, применение метода конечных элементов к задачам механики жидкости и газа и т.д.

## Список использованной литературы

1. Г.Н. Дульнев. и др. Применение ЭВМ для решения задач теплообмена, М: Высшая Школа, 1990. 207 с.
2. Е.А. Власова, В.С. Зарубин, Г.Н. Кувыркин. Приближённые методы математической физики, М: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2001, 700 с.
3. Г. В. Корнев. Тензорное исчисление: Учеб. пособие: Для вузов. — М.: Изд-во МФТИ, 2000. — 240 с,
4. J.H. Ferziger, M. Perić. Computational Methods for Fluid Dynamics 3., rev. ed. - Berlin; Heidelberg; New York; Barcelona; Hong Kong; London; Milan; Paris; Tokyo: Springer, 2002
5. С. Патанкар. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости: Пер. с англ. – М.: Энергоатомиздат, 1984. – 152 с., ил.
6. А.Д. Мышкис. Прикладная математика для инженеров. Специальные курсы. М: ФИЗМАТЛИТ, 2007 – 688 с.
7. А.Д. Мышкис. Лекции по высшей математике. М: «Наука», 1973, 640 с.
8. Андерсон Д., Таннехилл Дж., Плетчер Р. Вычислительная гидромеханика и теплообмен: В 2-х т. Т. 1: Пер. с англ. —М.: Мир, 1990. —384 с, ил.
9. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Вычислительная теплопередача. – М: Едиториал УРСС, 2003. – 784 с.
10. И.А. Белов, С.А. Исаев. Моделирование турбулентных течений: Учебное пособие, Балт. гос. техн. ун-т. СПб., 2001. 108 с.
11. К.Н. Волков, В.Н. Емельянов. Моделирование крупных вихрей в расчётах турбулентных течений. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. – 368 с.
12. Л.Г. Лойцянский. Механика жидкости и газа. Изд. 5-е, переработанное, Главная редакция физико-математической литературы издательства «Наука», М., 1978, 736 стр.

13. А.С. Монин, А.М. Яглом. Статистическая гидромеханика, Часть I. Главная редакция физико-математической литературы издательства «Наука», М., 1965 г., 640 стр.
14. Альбом течений жидкости и газа: Пер. с англ./ Сост. М. Ван-Дайк. – М: Мир. 1986. – 184 с.
15. Г.А. Дрейцер Основы конвективного теплообмена в каналах: Учебное пособие. – М.: МАИ, 1989, 84 с.
16. M. Ciofalo. Large-Eddy Simulation: A Critical Survey of Models and Applications//Advances in Heat Transfer, Vol.25., pp.321-419.
17. О.С. Сергель. Прикладная гидрогазодинамика: Учебник для авиационных вузов. — М.: Машиностроение, 1981.— 374 с.
18. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика: Учеб. Пособ.: Для вузов. В 10 т. Т. VI. Гидродинамика. – 5-е изд., стереот. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. – 736 с.
19. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика: Учеб. Пособ.: Для вузов. В 10 т. Т. I. Механика. – 5-е изд., стереот. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. – 224 с.
20. И.Дьярмати. Неравновесная термодинамика. Теория поля и вариационные принципы. М.: Мир, 1974, 303 с.
21. И. Пригожин, Д. Кондепуди. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур: Пер. с англ. Ю.А. Данилова и В.В. Белого – М.: Мир, 2002. – 461 с.
22. Л. Сегерлинд. Применение метода конечных элементов: Пер. с англ. М.: Мир. 1979. – 393 с.
23. Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.Мир, 1999
24. Молчанов А.М. Расчет струй с неравновесными химическими реакциями. В кн. Современные проблемы теплообмена в авиационной технике. М. 1983. с.15-19.