

# 计算传热学的近代进展

## Recent Advances in Computational Heat Transfer



**主讲：陶文铨, 陈黎, 陈磊**

西安交通大学能源与动力工程学院  
热流科学与工程教育部重点实验室

**2017年4月17, 西安**

## 课程简介

1. **参考教材** –
  - 1) 陶文铨编著: 《计算传热学的近代进展》, 2000, 科学出版社;
  - 2) 何雅玲, 王勇, 李庆编著. 格子Boltzmann方法的理论及应用. 2009, 北京: 科学出版社
  - 3) D. C. RAPAPORT, The art of Molecular Dynamics Simulation (Second Edition), Cambridge University Press, 2004
2. **学时分配** – 32学时课堂教学; 8学时课外自学、课程论文撰写及答辩;
3. **教学方法** – 开放, 参与, 应用 – open; participation and application
4. **讲授方法** – 粗细结合、给出文献;
5. **课程考核** – 课程论文撰写及论文答辩。

# 本课程教学内容

第1章 绪论

第2章 网格生成技术

第3章 对流项离散格式研究进展

第4章 速度与压力耦合算法的发展

第5章 代数方程求解方法

第6章 扑捉相界面的VOSET方法

第7章 数值解的考核与验证及FVM数值解的误差分析

第8章 格子-Boltzmann方法的理论基础

第9章 格子-Boltzmann方法模拟多孔介质内的单相流动和传热传质

第10章 格子-Boltzmann方法模拟多相流和反应流

第 11 章 分子动力学模拟计算的原理

第 12 章 分子动力模拟物理量计算方法

第 13 章 分子动力学模拟应用实例

## 教学时间

**1. 第 9-16周:**每周1(9/10),3(1/2);

**2. 上课教室:** 东3楼2楼热流科学报告厅;

**3. 教师如有请假将遵照学校规定会至少提前1次课通知, 且不超过3次。**

课程QQ群: **632016917**

# 数值模拟的重要性与意义

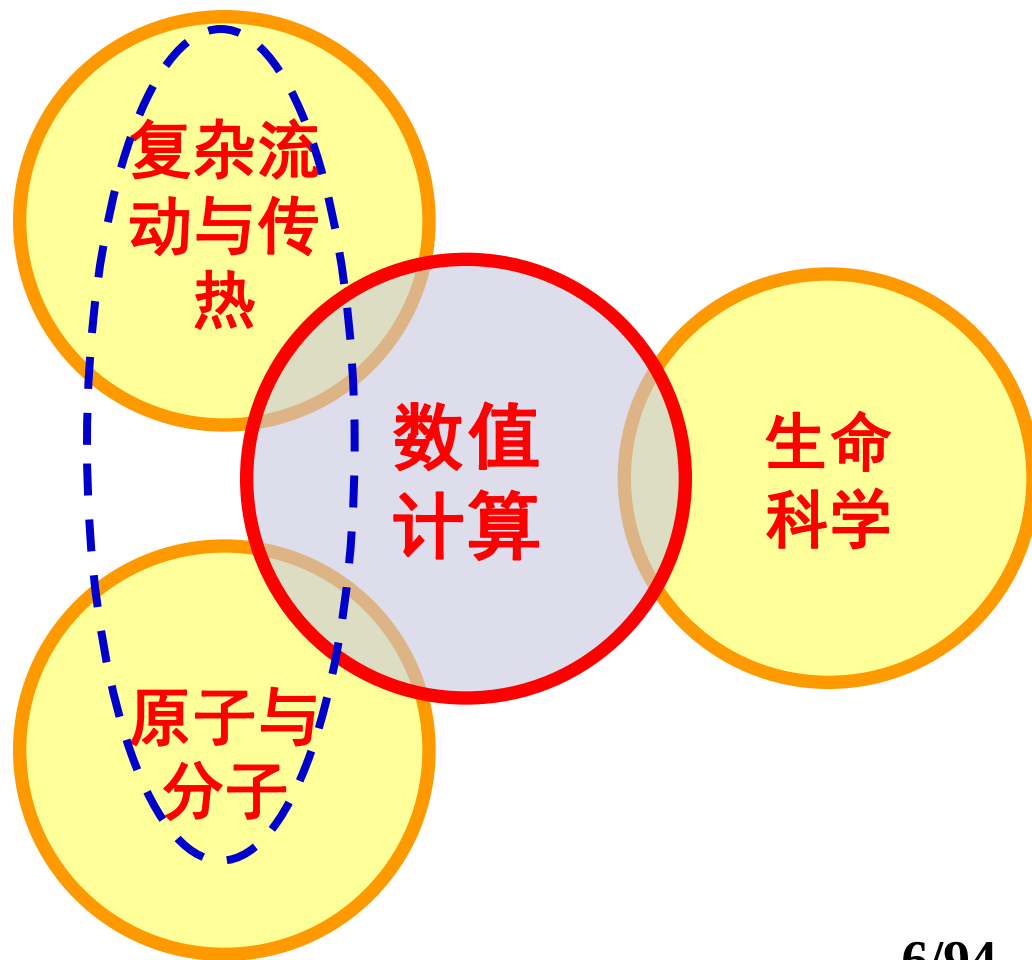
复杂的传热、传质与流动过程由一组高度非线性的偏微分方程组及相应的初、边界条件所描述；

宏观方法的数值模拟就是将这组偏微分方程组及初始与边界条件转化为计算区域上代表性地点（节点）上的一组大型代数方程组（离散化），并用计算机求解之。

传热问题数值计算是计算科学的重要组成部分，**2005年美国总统顾问委员会**提出要发展计算科学以确保美国在世界上的竞争能力。

历史上，1985年西欧共同体曾经将**PHEONICS**列为对共产党国家禁运的产品。

理论分析、实验研究与数值模拟是当代科学研究的三个相辅相成的重要手段；数值模拟是多学科交叉领域，在探索未知、促进科技发展和国防安全等方面具有不可替代的作用。



● **计算机模拟已经进入社会学**: 2009年4月30号美国开启了对一个新的研究领域 “Computational Social Systems” 的支持计划。

## **Social-Computational Systems (SoCS)**

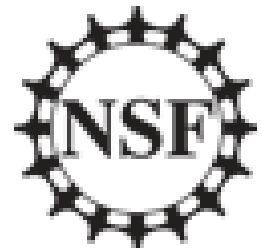
NSF of USA Issued following founding program on April 30, 2009

**PROGRAM SOLICITATION**

**NSF 09-559**

**National Science Foundation**

Directorate for Computer & Information Science & Engineering  
Division of Information & Intelligent Systems  
Division of Computer and Network Systems  
Division of Computing and Communication Foundations



Directorate for Social, Behavioral & Economic Sciences  
Division of Behavioral and Cognitive Sciences  
Division of Social and Economic Sciences

● **人脑功能实现计算机模拟**：瑞士洛桑联邦工学院联合13家欧洲知名学术机构组成研究团队获得欧盟的拨款。利用位于德国的一台新型超级计算机进行。已成功模拟老鼠的大脑皮层柱，而人有100万个大脑皮层柱，必须执行每秒100亿亿次计算，所消耗的电力需要一个核电站（泰晤士报20120415）。

● **首个演示宇宙大爆炸过程的计算机模型研制成功**：法国科学家在超级计算机上追踪了5500亿个粒子演化情况模拟了从大爆炸至今的全部宇宙结构，首次演示了1/3项目（科技日报20120414-1）。

## 有关的主要国际期刊

1. Numerical Heat Transfer, Part A- Applications; Part B-Fundamentals
2. International Journal of Numerical Methods in Heat and Fluid Flow
3. International Journal of Numerical Methods in Fluids.
4. Computer & Fluids
5. Progress in Computational Fluid Dynamics
6. Journal of Computational Physics
7. International Journal of Numerical Methods in Engineering
8. Computer Methods of Applied Mechanics and Engineering
9. Engineering Computations
10. Computer Modeling in Engineering & Science
11. Mathematical and Computational Simulation
12. Multiscale Computational Engineering
13. Multiscale Modeling and Simulation
14. Journal of Computational Physics
15. ASME Journal of Heat Transfer
16. International Journal of Heat and Mass Transfer
17. ASME Journal of Fluids Engineering
18. International Journal of Heat and Fluid Flow
19. AIAA Journal
20. Physical Review E;
21. Physics in Fluids

# 计算传热学的近代进展

## Advances in Computational Heat Transfer

### 第一章 绪论



主讲 陶文铨

西安交通大学能源与动力工程学院  
热流科学与工程教育部重点实验室  
2017年4月17日, 西安

# 绪论目录

**1.1 三个层次上流动与传热传质问题的数值模拟**

**1.2 基于连续介质假定的传热传质与流动问题数值计算概述**

**1.3 传热传质与流动问题的数值计算的近代发展综述**

**1.4 流动与传热传质问题的多尺度数值模拟简介**

# 1.1 三个层次上流动与传热传质问题的数值模拟

## 1.1.1 概述

## 1.1.2 气体介质三个层次模拟的区域划分

## 1.1.3 液体在微细通道中的流动与换热

## 1.1 三个层次上流动与传热传质问题的数值模拟

### 1.1.1 概述

#### 1. 宏观层次（连续介质层次，Macroscale-level）

离散求解质量守恒、动量守恒和能量守恒方程、组分守恒为主要内容的各种方法，已获得广泛的工程应用。

宏观层次的数值方法：有限差分法，有限容积法，有限元法，边界元法，有限分析法，谱分析法。

现有著名的商业软件：PHOENICS，FLUENT，CFX，STAR-CD，NUMECA 等均基于宏观的方法。

## 2. 介观层次 (Mesoscale-level)

对大量的“大分子”（粒子）应用动力学基本方程研究其运动特性，按某种平均方式获得宏观参数分布。DSMC (direct simulation of Monte Carlo method) 以及LBM (lattice-Boltzmann method) 均属之。

DSMC 仅适用于气体, 特别是当分子的平均自由程与所在空间的几何特征尺度可以相比拟时, 计算费时, 目前只限于很小的计算区域（一般为毫米级别的几何区间）；

LBM 则可用于模拟气体和液体的流动与传热, 计算空间也没有严格限制, 上可接宏观、下可接微观。

### 3. 微观层次 (Microscale-level)

对分子、电子、光子、声子等的大量微观粒子的运动状态进行模拟，宏观量是其统计平均值。

Molecular dynamics simulation — **MDS**, 基于牛顿第二运动定律,  $F=ma$ ;

Quantum molecular dynamics simulation — **QMDS**, 则基于非稳态的 Schrodinger 方程。

#### 1.1.2 气体介质三个层次模拟的区域划分

1.1946年钱学森先生提出:

以Knudsen数大小将气体分为四个区域:  $Kn = \frac{\lambda}{L}$

分子平均自由程

容器的特征尺度

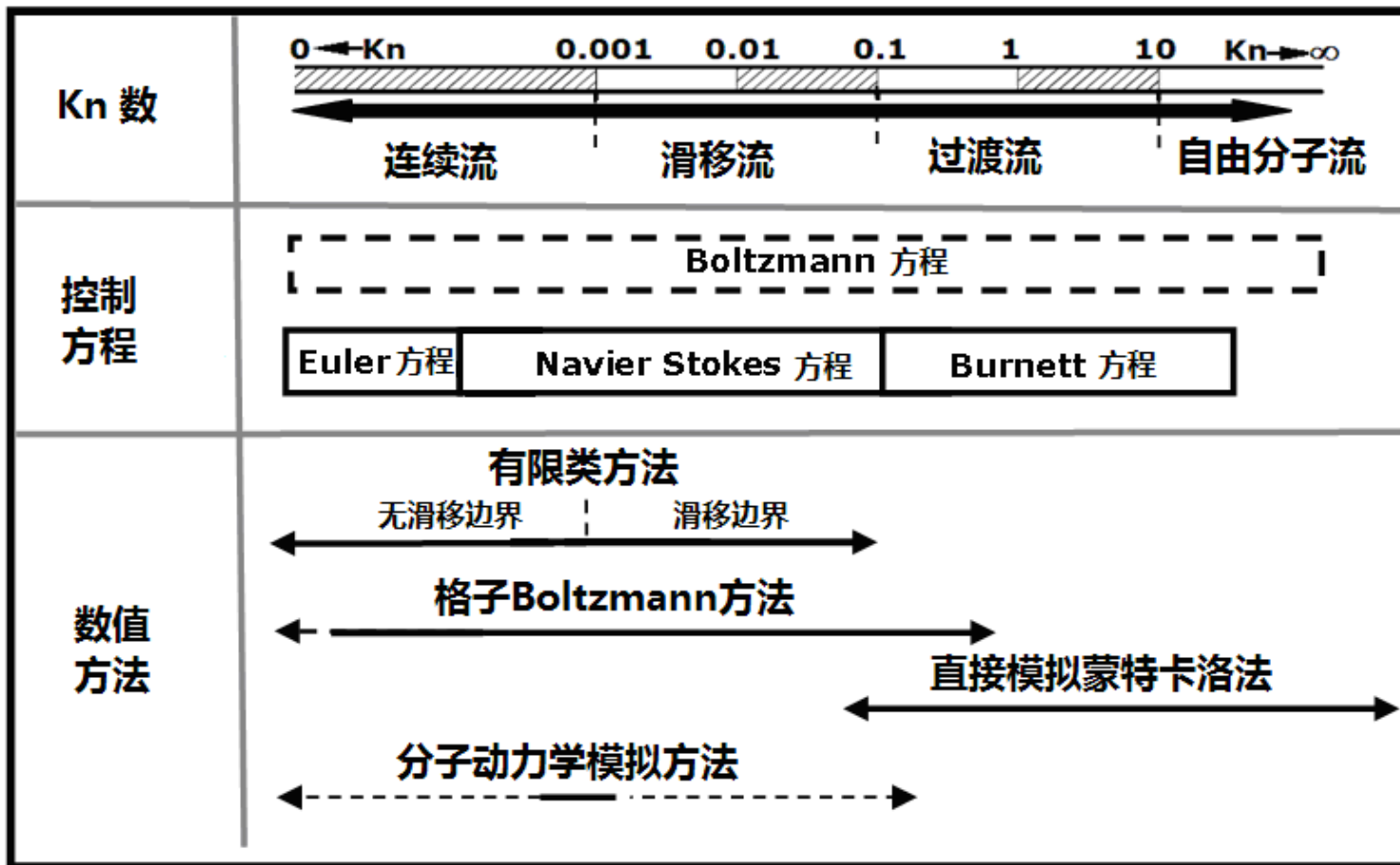
$$Kn = \frac{\lambda}{L} = \begin{cases} \leq 0.001 & \text{连续介质区域} \\ 0.001 < Kn \leq 0.1 & \text{滑移、跳跃区域} \\ 0.1 < Kn \leq 10 & \text{过渡区域} \\ \geq 10 & \text{自由分子流区域} \end{cases}$$

Kn — Knudsen 数 (**K不发音!**)

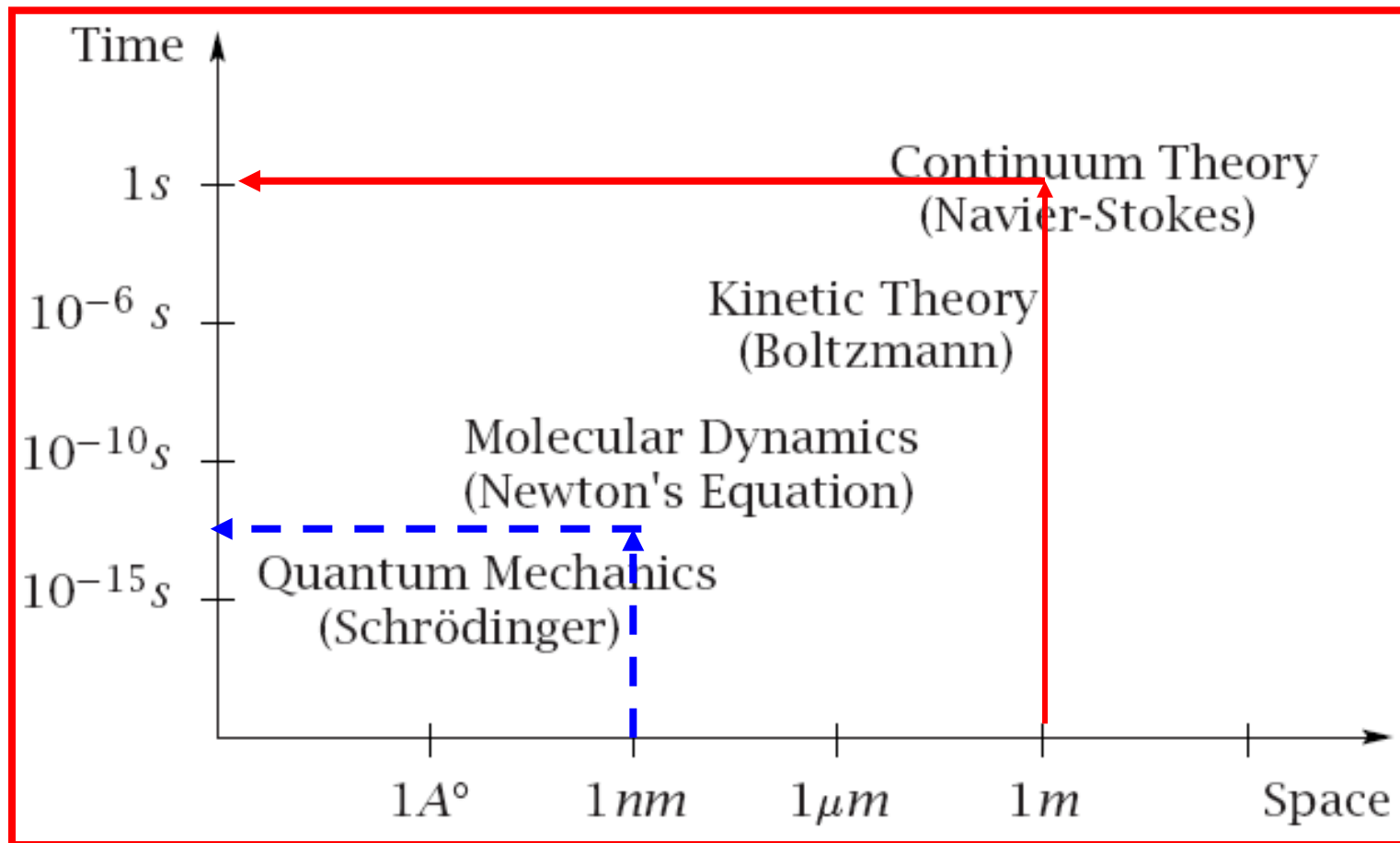
某些情形下可对不同的区域采用同一种数值方法。

但一般情形下不同的区域宜采用不同的数值模拟方法、在界面上进行信息耦合的方法总体上更为经济。

# 适用于气体的微观与宏观问题的数值方法分类



MD计算的分子数目受到计算资源的限制，近年来最多已达10000亿个分子的量级（ $10^{12}$ ）。



## 几何尺度与特征时间的关系

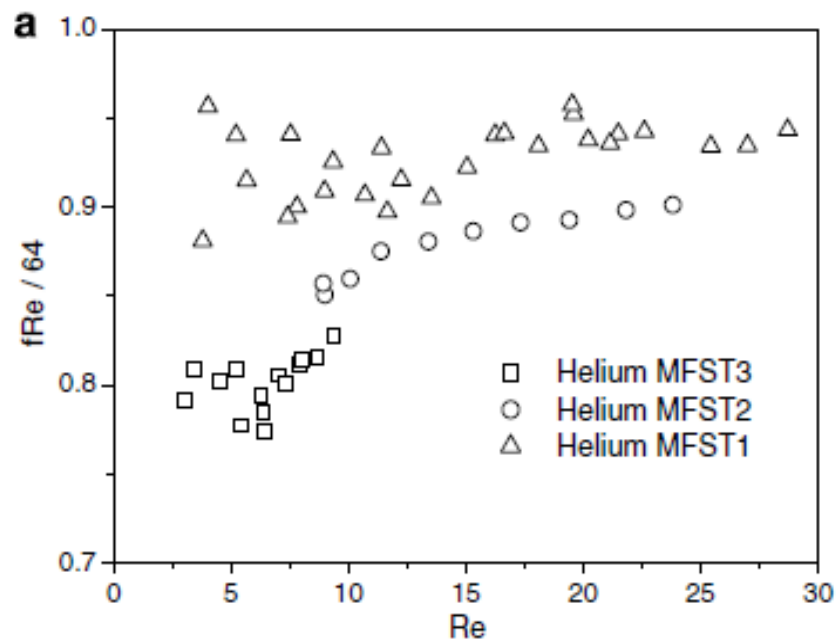
E Weinan and Engquist Bjorn. Multiscale modeling and computation. NOTICES OF THE AMS, 2003, 50 ( 9 ) : 1062-1070

## 2. 气体在微通道内的流动与常规通道的区别。

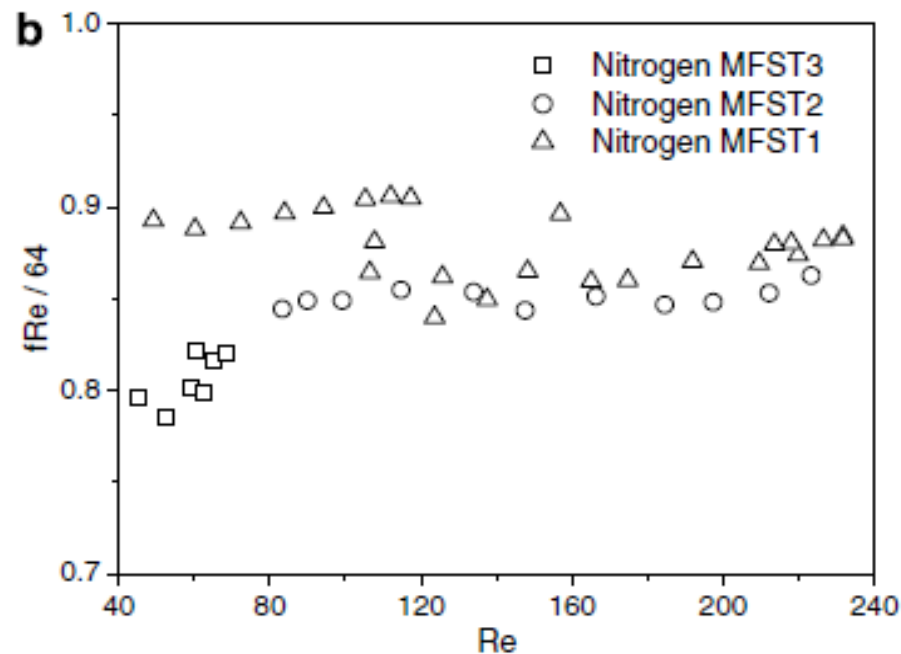
(1) 稀薄效应：当Knudsen数大于0.001后，滑移的速度边界条件，跳跃的温度边界条件，以及Kn大于0.1后的过渡流（NS方程完全不合适）造成的影响均称为稀薄效应（**Rarefaction**）；稀薄效应使流动阻力降低

(2) 可压缩效应(**Compressibility**)：流体力学中一般认为局部Mach数大于0.3要考虑压缩性；在微细通道中即使当地速度很小，但是由于极大的压降，使得气体的密度发生剧烈变化，而必须考虑压缩性，称为低Mach数可压缩流动。可压缩效应使流动阻力增加。

## 稀薄效应使流动阻力降低



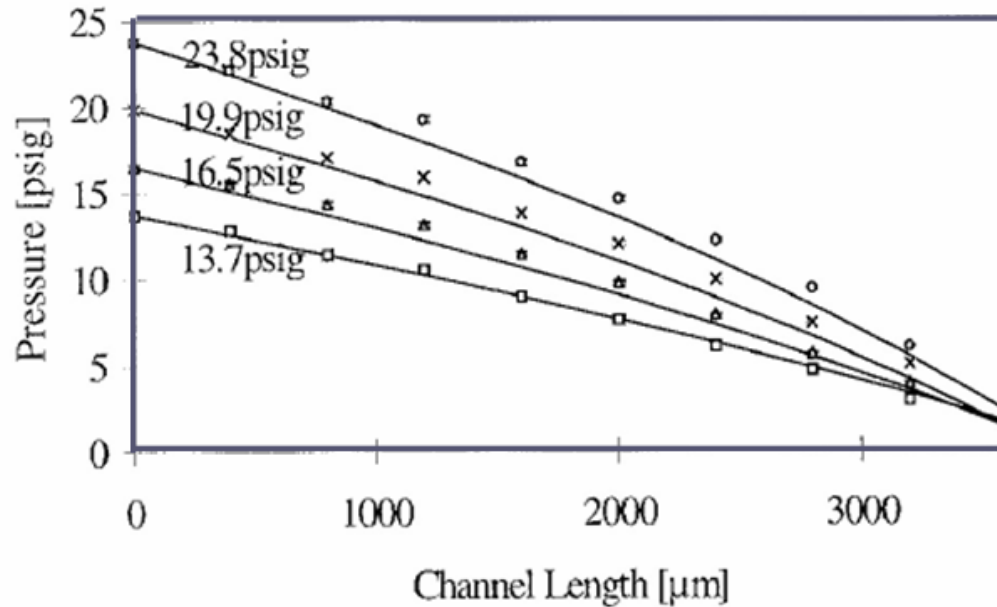
(a) Helium



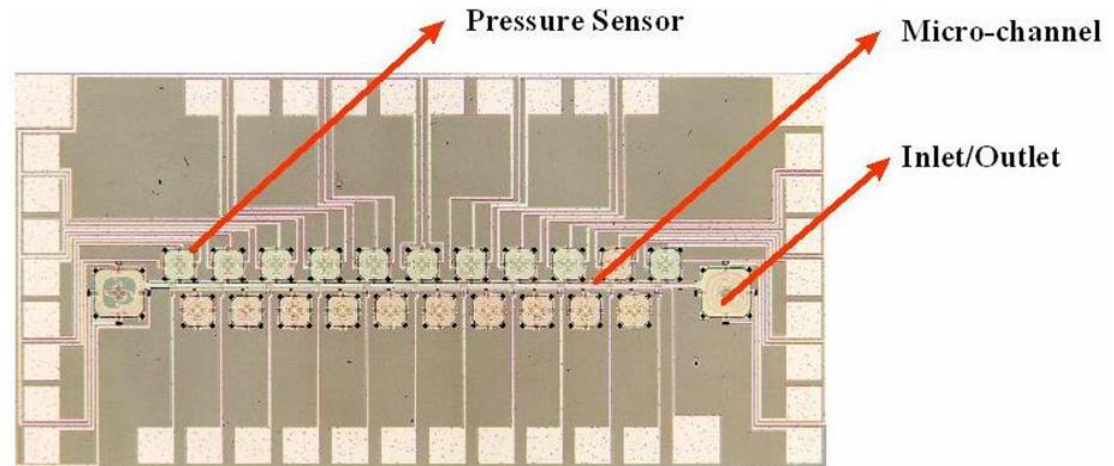
(b) Nitrogen

显示稀薄效应的实验结果

# 可压缩效应使流动阻力增加。



K.C.Pong, C.M. Ho, J. Liu, Y.C.Tai.  
Nonlinear pressure distribution in  
uniform microchannels. *ASME FED.*  
197:51-6 (1994).

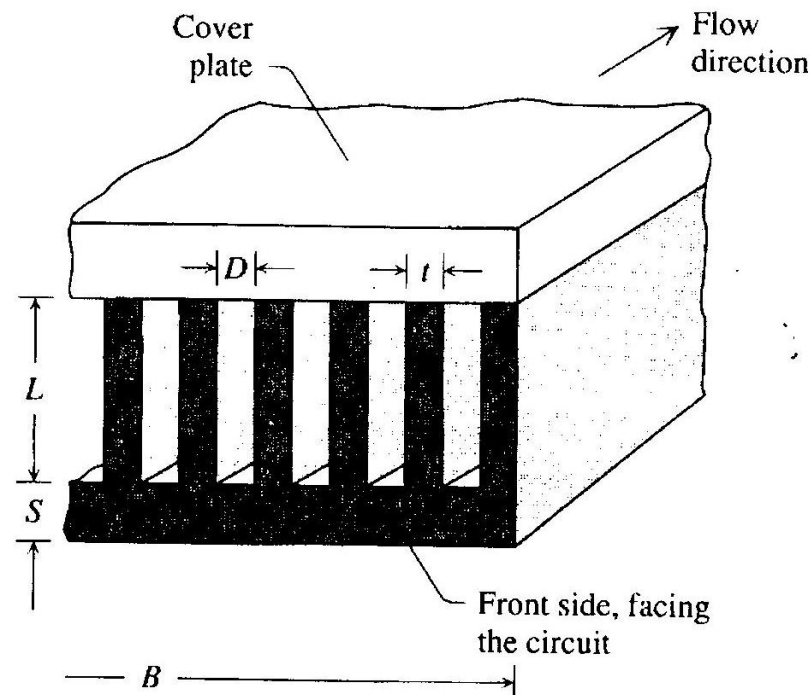


## 1.1.3 液体在微细通道中的流动与换热

### 1. 概述

**1981年美国IEEE的Tuckerman 与Peace 使水在直径小于1mm的一组微细通道流动来冷却电子器件，获得了大于 $700\text{W}/\text{cm}^2$ 的高热流密度，开创了微米传热研究的新纪元。**

Tuckerman D B, Pease R F W. High-Performance heat sinking for VLSI. IEEE Electron Device Letters, 1981, EDL-2: 125—129



**1983年**美国Stanford大学物理系中国访问学者吴沛宜和美国导师**Little**首次发表了对于尺度在几十微米通道内气体流动阻力的测定结果，此后微细通道内流动与传热的研究迅速在全世界开展起来。

**1989年**，在美国盐湖城会议上，首次提出MEMS概念：Micro-Electro-Mechanical Systems，这是**指特征尺度在 1mm－1微米之间集电子、机械于一身的器件**。在这样的器件中有气体或者液体作为工作介质，其内的流动与换热就是所谓的微尺度流动与换热。

## 2. 微细通道内液体的流动与换热与常规通道中的区别主要来自以下原因:

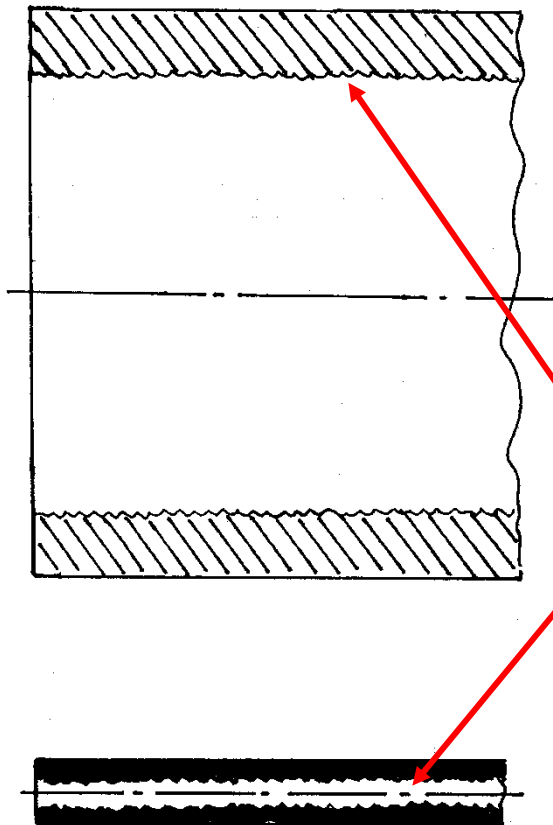
### (1) 固体表面粗糙度的影响

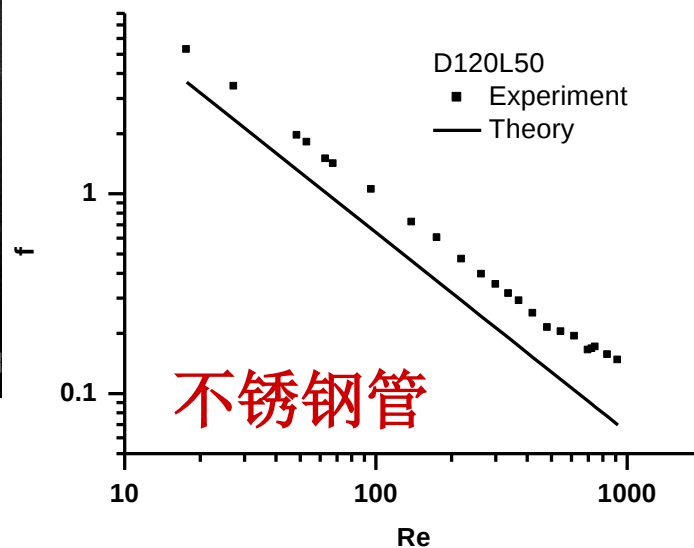
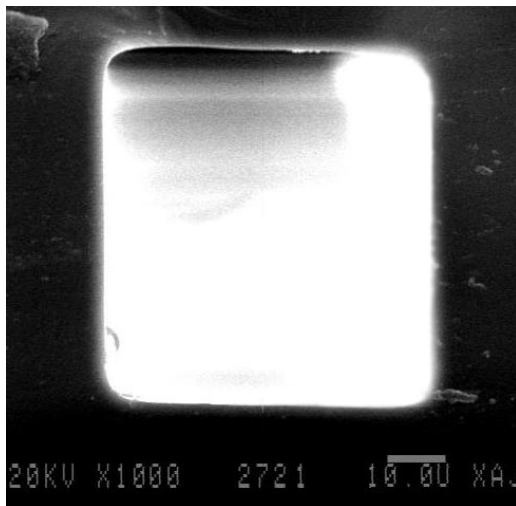
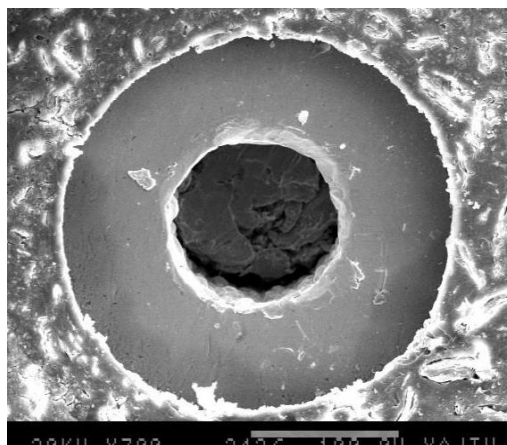
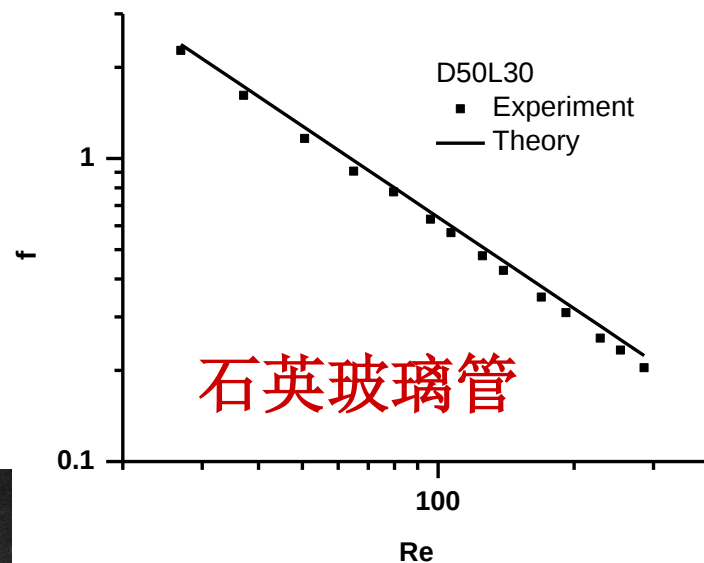
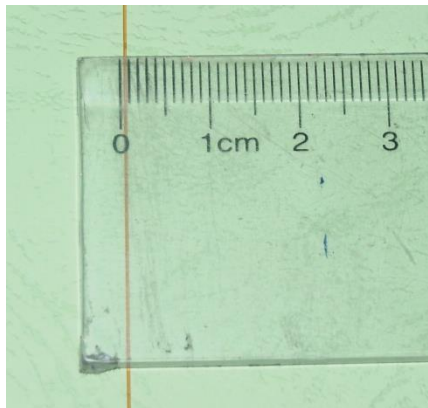
微通道中相对粗糙度大于1%就对层流阻力系数有影响，常规通道层流时粗糙度无影响。

Conventional channel

The same absolute roughness

Microchannel



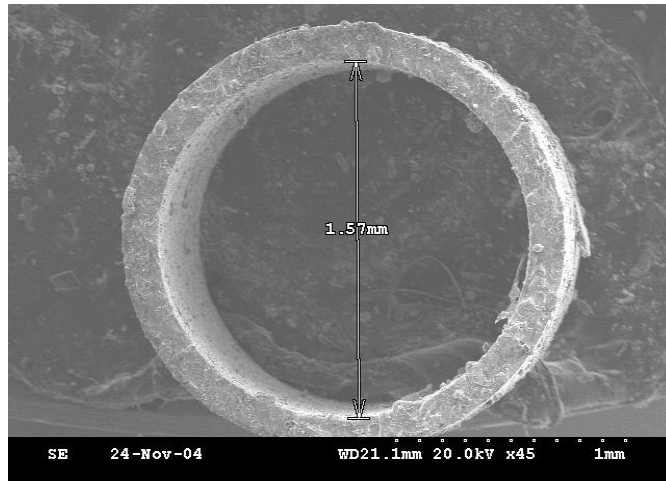


放大300倍内径  
120微米不锈钢  
管表面粗糙情形

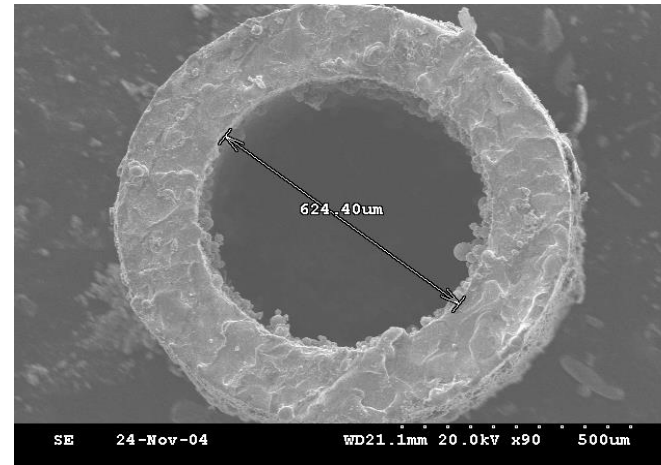
放大1000倍内径  
的石英玻璃管，  
内径120微米

液体层流充分发展流动  
阻力系数的实测结果

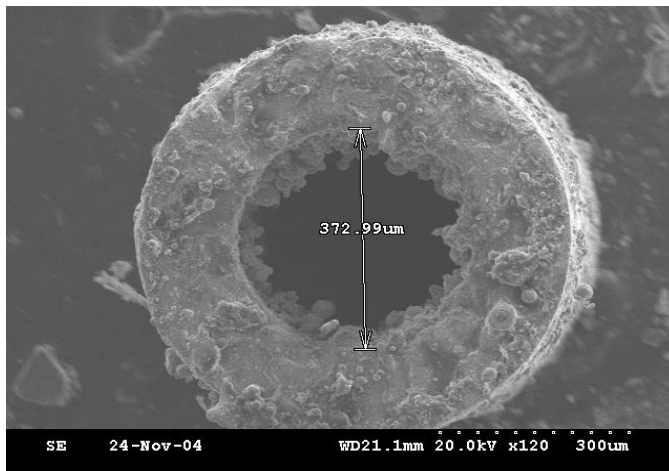
## (2) 固体管壁导热的影响



(a) No. 1: 1570  $\mu\text{m}$  , EF=45



(b) No. 2: 624.4  $\mu\text{m}$  , EF=90

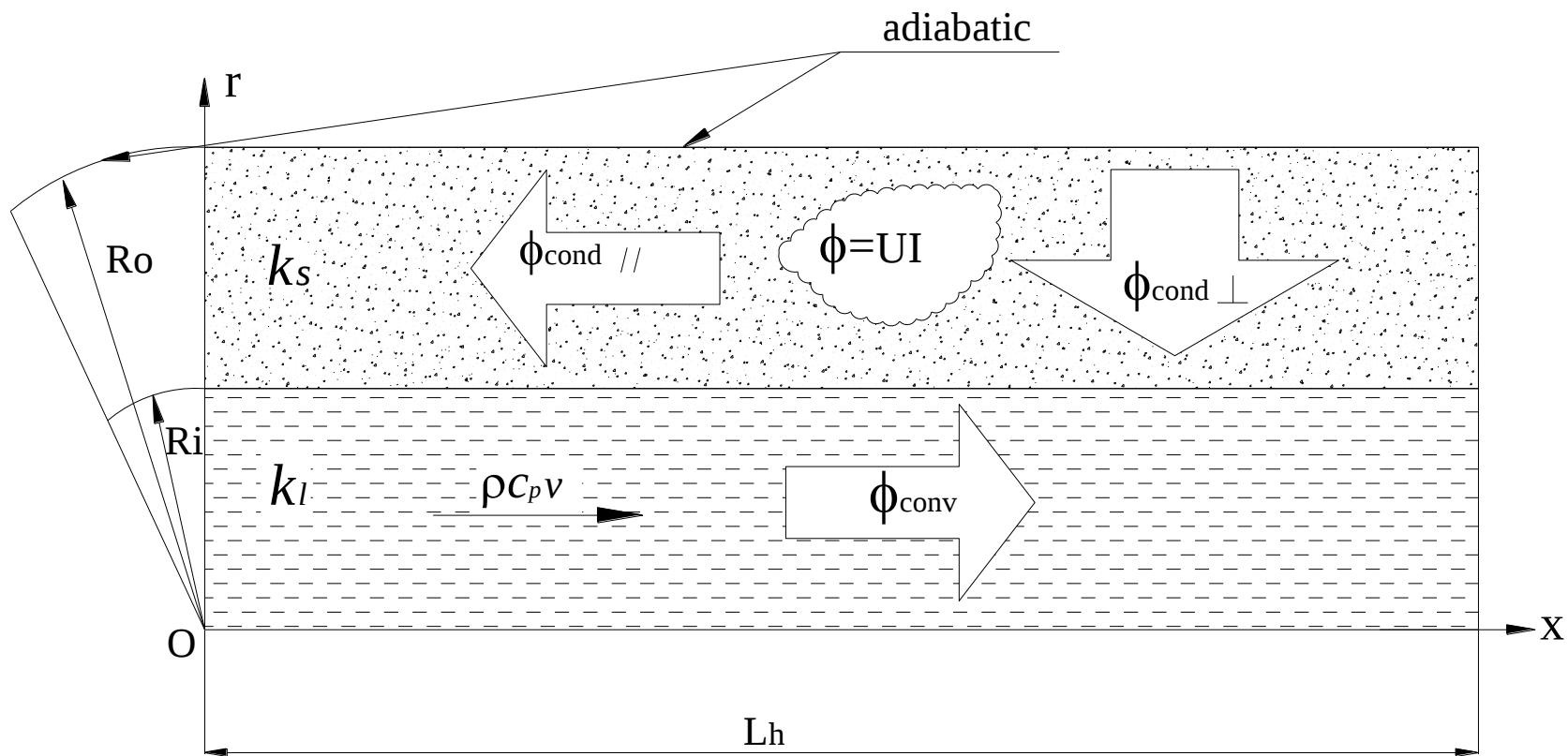


(c) No. 3: 372.9  $\mu\text{m}$  , EF=120

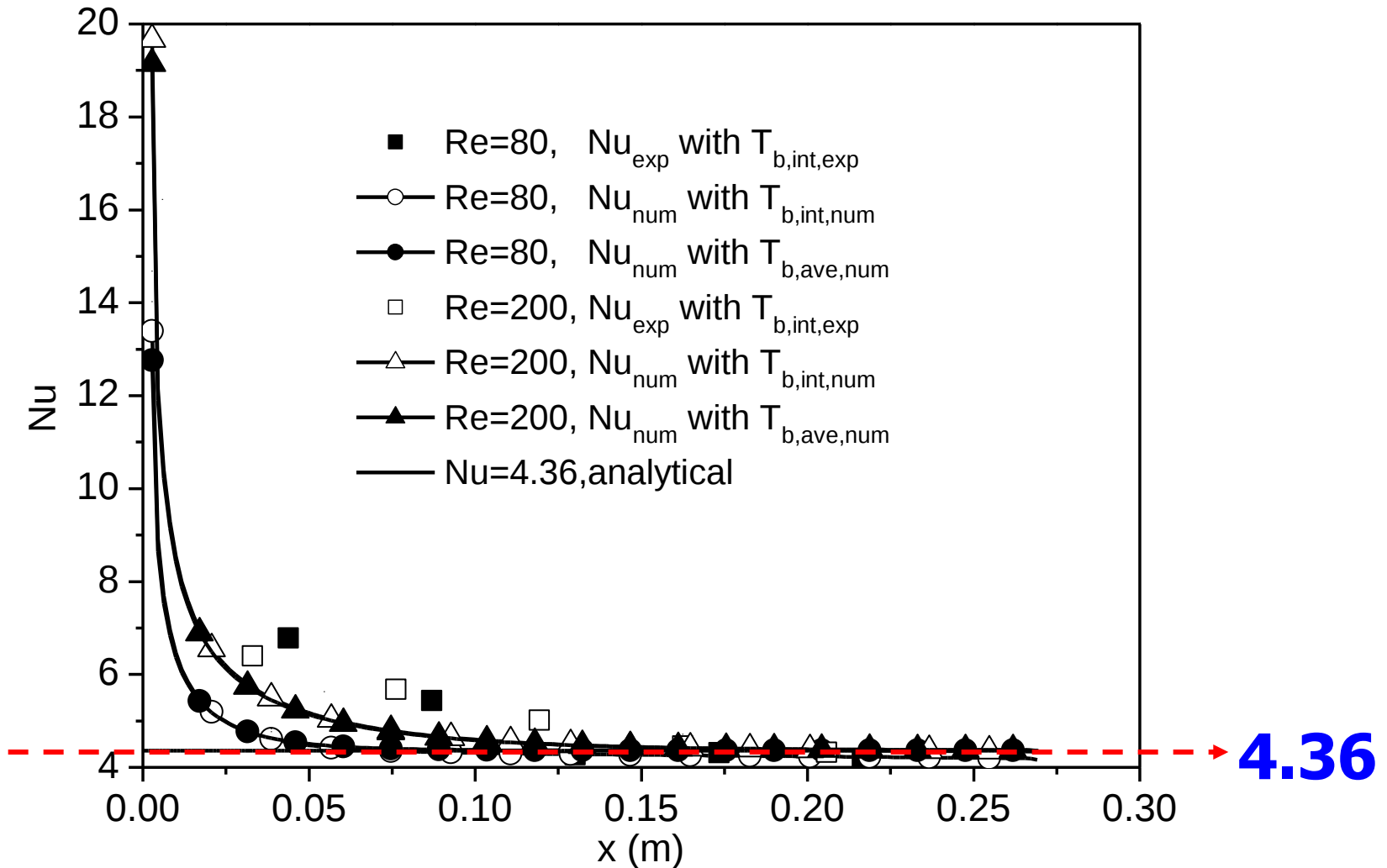
三种不同壁厚管子的  
截面扫描图象

在均匀热流密度的条件下对三种不同壁厚与内径之比的管子内的对流换热进行了实验测定，管壁的导热系数相同。管子有关参数如下：

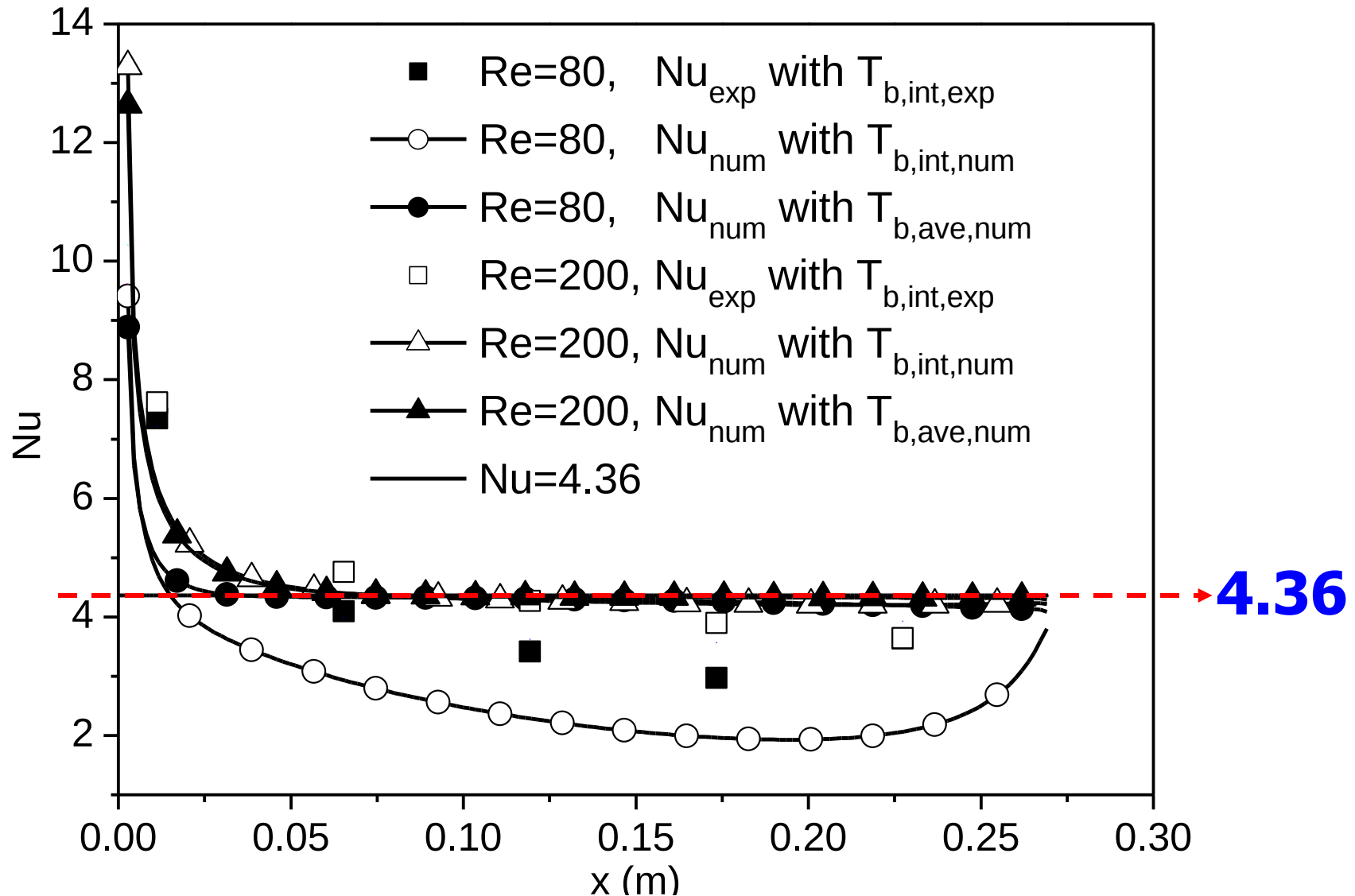
| Tube | $\frac{D_i}{D_o}$<br>$\mu\text{m}/\mu\text{m}$ | L<br>/mm | $L_h$<br>/mm | $\frac{D_o - D_i}{2D_i}$ | $\varepsilon_{ave}$<br>/ $\mu\text{m}$ | $\varepsilon_{ave}/D_h$<br>% | $\lambda$<br>/W/(m·K) | $\phi$<br>/W |
|------|------------------------------------------------|----------|--------------|--------------------------|----------------------------------------|------------------------------|-----------------------|--------------|
| #1   | 1570/1810                                      | 300      | 270          | 7.6%                     | 15                                     | 0.95                         | 16.3                  | 15           |
| #2   | 624.4/1000                                     | 300      | 270          | 30%                      | 9                                      | 1.4                          |                       | 12           |
| #3   | 373/670                                        | 300      | 270          | 40%                      | 9                                      | 2.4                          |                       | 9            |



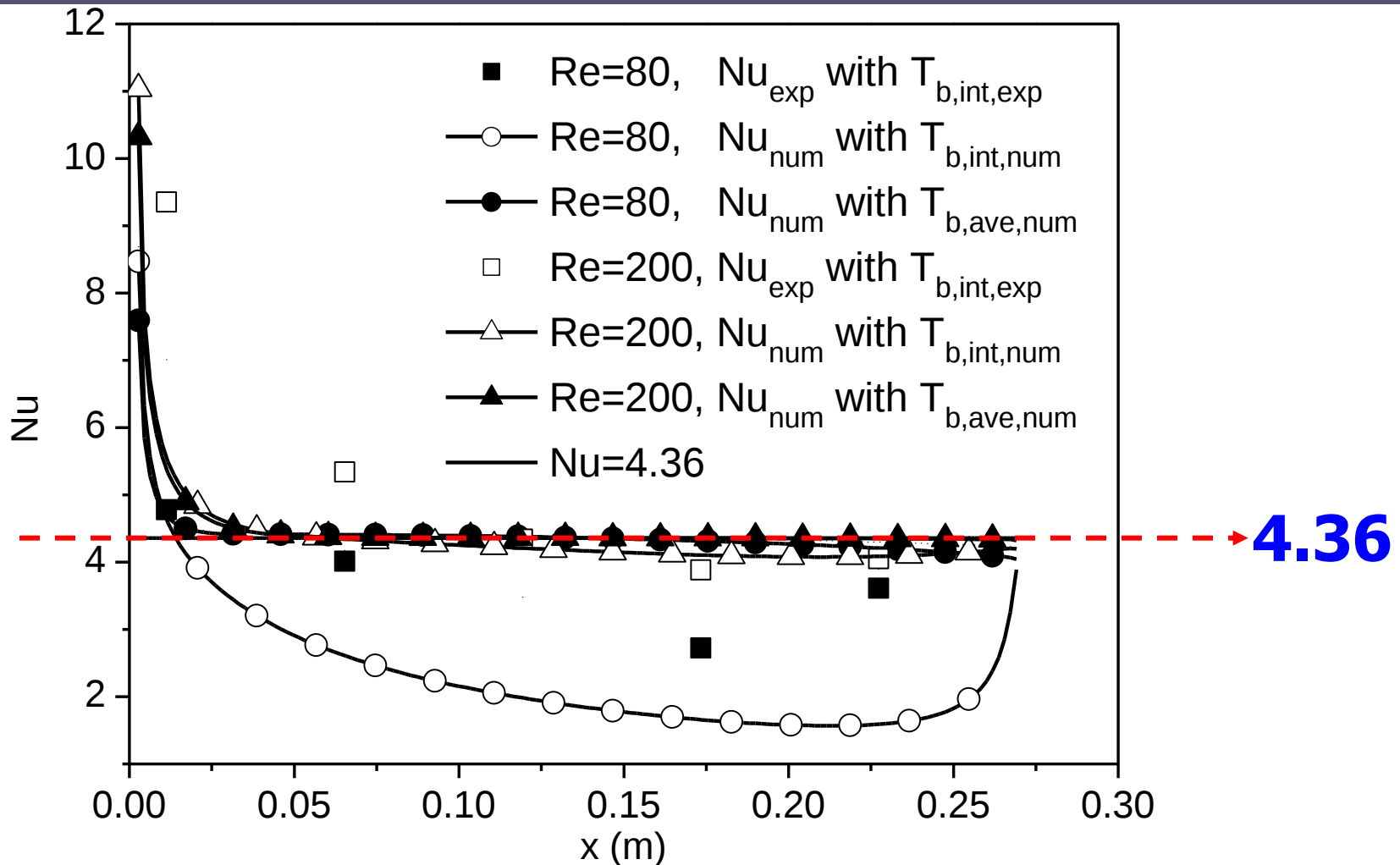
有限容积法数值模拟计算区域



对No.1( $D_i/D_o=1570/1810$  微米, 7.36%)管子的结果



对No.2( $D_i/D_o=624.4/1000$  微米, 30%) 圆管的测定结果

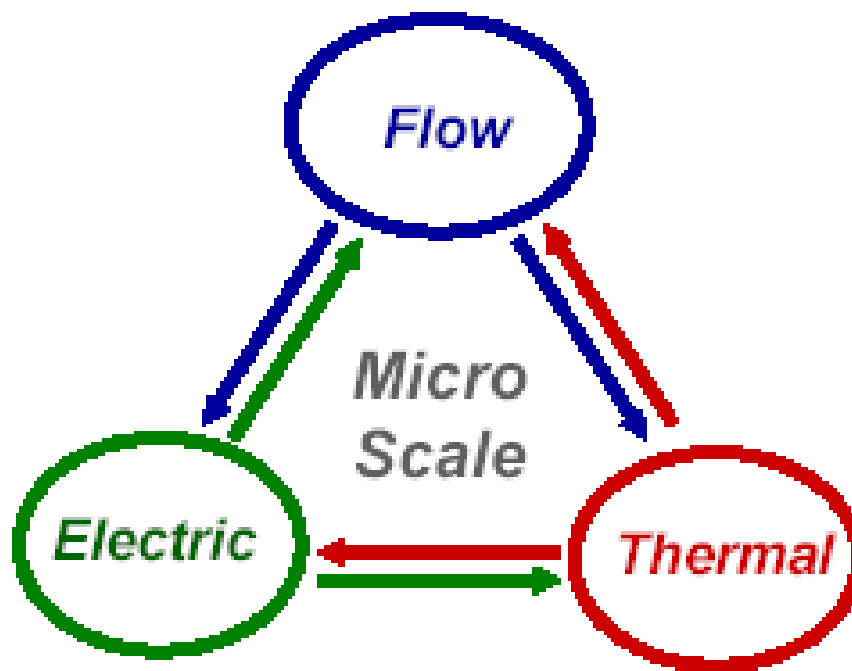


对No.3( $D_i/D_o=373/670$  微米, 40%)圆管的测定结果

Li Z., He Y. L., Tang G. H., and Tao W. Q. Experimental and Numerical Studies of Liquid Flow and Heat Transfer in Microtubes, Int. J. Heat Mass Transfer, 2007, 50: 3447-3460.

### (3) 电双层效应

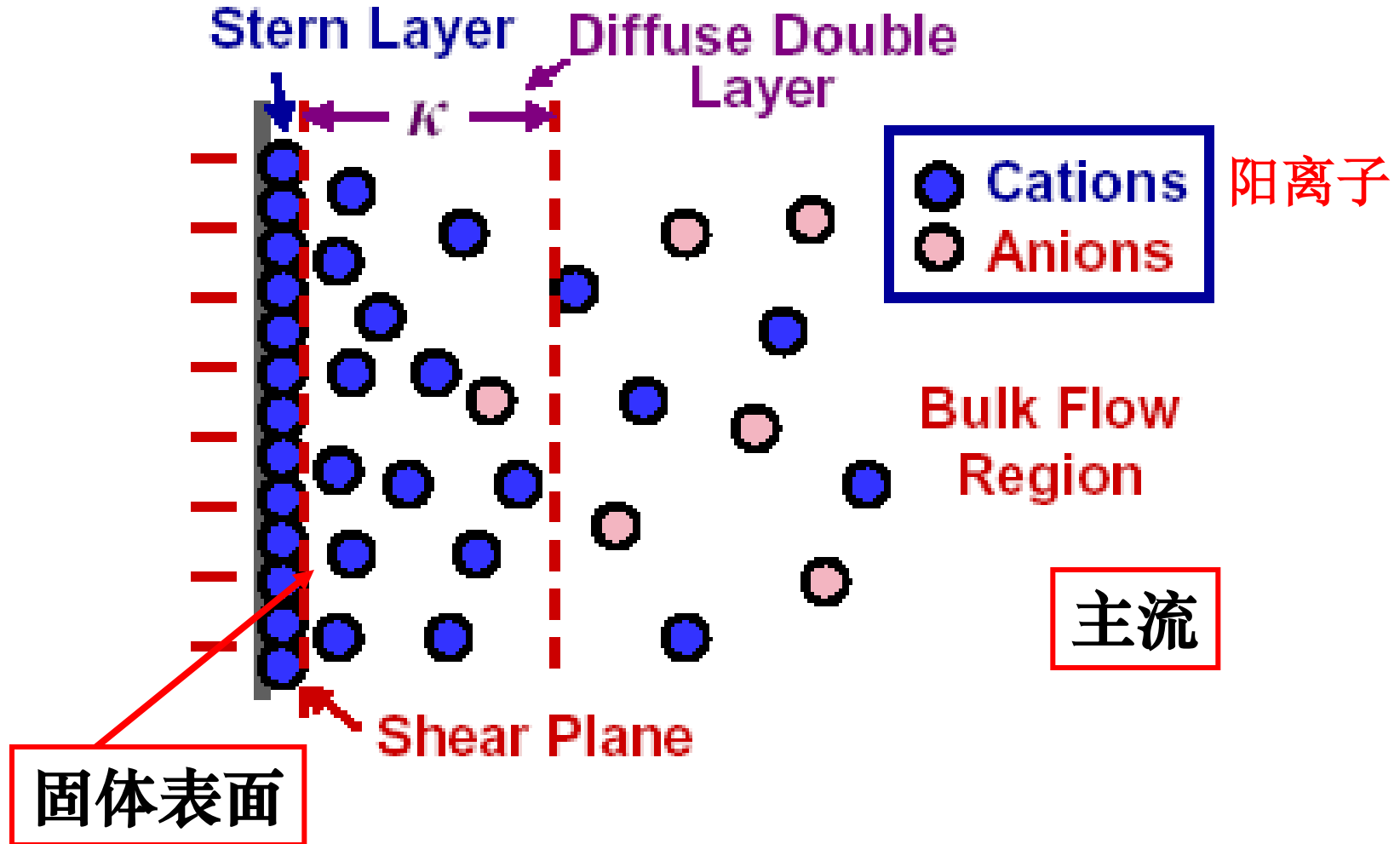
对某些液体与固体表面的组合，可能出现双电层（**Electric Double Layer**），电粘性，电渗，电泳等现象。



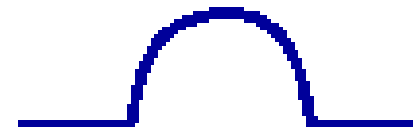
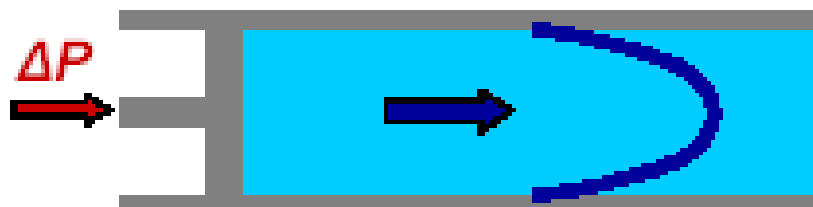
热、流、电相互作用示意图

非导体的固体壁面与电介质液体接触时，由于非导电体的固体表面常常有一层负的电荷，使电介质中的阳离子向壁面靠近，而阴离子被排斥，在固体壁面附近形成所谓的双电层 (**Electric double layer**)。当在微通道中有外电场作用时，双电层(扩散层)中的阳离子带动流体分子向阴极流动，这就是电渗流 (**Electroosmotic flow**)。

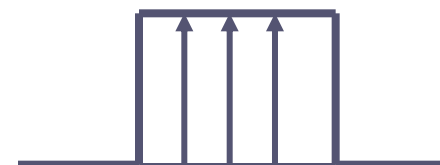
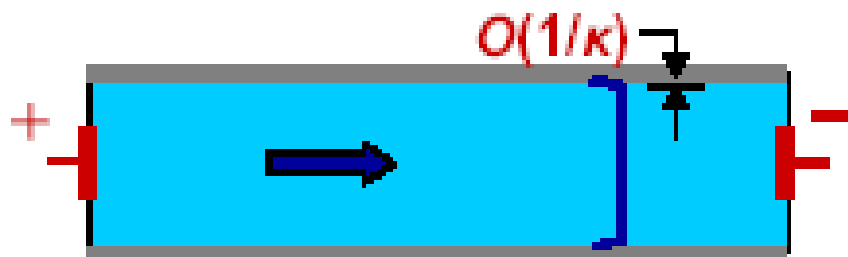
电渗流的特点是仅在极薄的一层（几十纳米量级）内流体速度从壁面的零而升高到主流值，呈典型的段塞流的速度分布。



双电层 (Electric double layer)



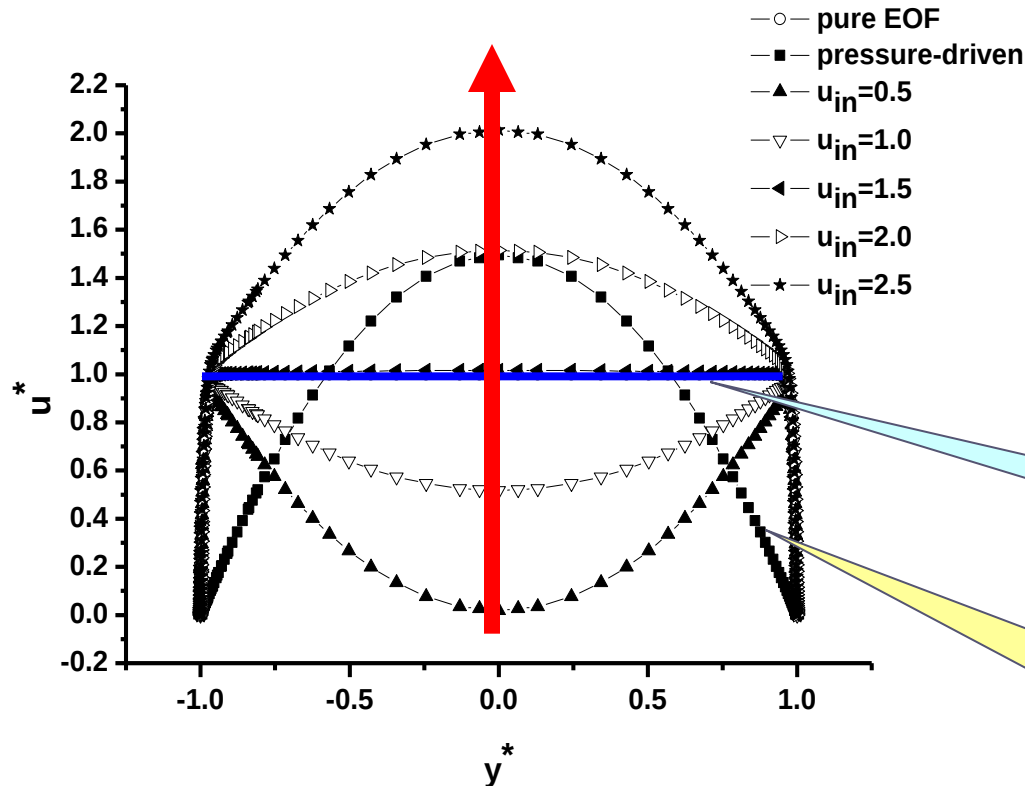
## 压力驱动流 Pressure-driven flow (PDF)



## 电渗流 Electroosmotic flow (EOF)

微细通道内电渗流与压力驱动流速度分布的对比

利用不可压缩流体的连续性、动量、能量方程以及 Nernst—Planck 的离子迁移方程和电场 Poisson 方程，对微通道中的电渗流进行了数值模拟。



电渗与压力驱动联合作用的流动速度分布

电渗流 (EOF)

压力驱动 (PDF)

李光熙，湍流的直接模拟及微尺度流动和换热研究，西安交通大学博士学位论文，2005年

### 1.1.4 气体、液体在微细通道中的尺度效应 (Size effect)

(1) 面积/体积之比的变化：通道尺度越小，此比值越大，与面积有关的量的影响增加，属于此类的物理量有(a) 阻力系数，(b) 与阻力有关的气体压缩性，(c) 电双层影响；

(2) 长度/长度之比的变化：

(a) 轴向导热的影响随着壁厚与管径之比的增加而显著；

(b) 气体稀薄性随其分子平均自由程与通道尺度之比的增加而越明显。

## 单相流体微通道流动传热的经典文献

1. D.B. Tuckerman, R.E. Pease, High-performance heat sinking for VLSI, *Electron Device Letters, IEEE*, 2 (5), 126-129 (1981).
2. D.B. Tuckerman, R.E. Pease, Optimized convective cooling using micromachined structure, *Journal of Electrochemical Society*, 129 (3), P.C. 98 (1982).
3. P. Y. Wu, and W. A. Little, Measurement of the friction factors for the flow of gases in very fine channels used for microminiature Joule-Thomson refrigerators, *Cryogenics*, 23, 273-277 (1983).
4. P. Y. Wu, and W. A. Little, Measurement of the heat-transfer characteristics of gas-flow in fine channel heat-exchangers used for micro/miniature refrigerators, *Cryogenics*, 24, 415-420 (1984).
5. J.C. Shih, C.M. Ho, J. Liu, Y.C. Tai, Monatomic and polyatomic gas flow through uniform microchannels. Proc. 1996 ASME Int. Mech. Eng. Congress and Exposition
6. K. C. Pong, C.M. Ho, J. Liu, Y.C. Tai. Nonlinear pressure distribution in uniform microchannels. ASME FED. 197:51-6 (1994).
7. C. M. Ho, Y. C. Tai. Micro-electro-mechanical systems (MEMS) and fluid flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.* 30:579-612 (1998).

### 1.1.5 气体、液体在微细通道中的流动与换热小结：

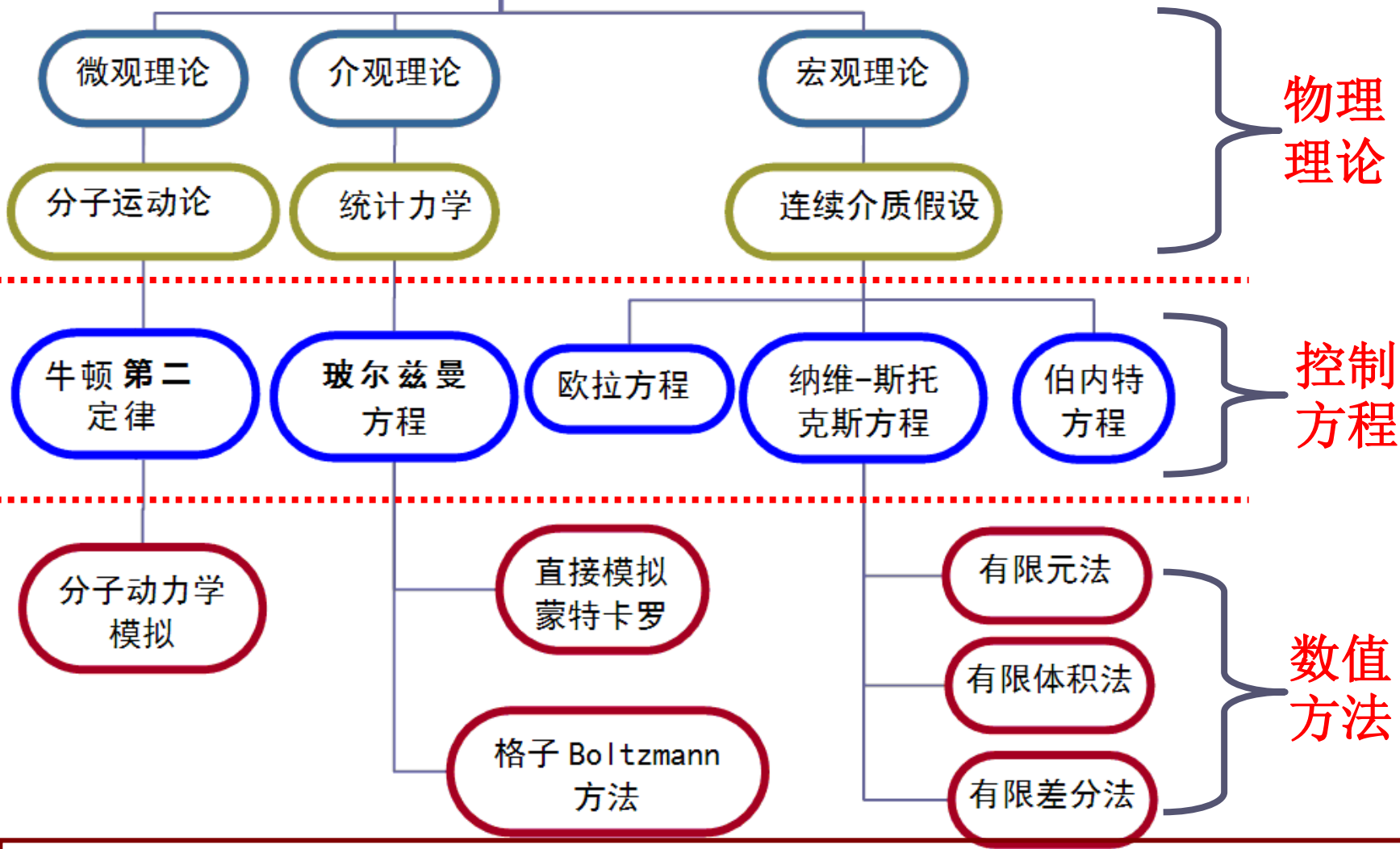
1. 对气体，需要按照其**Knudsen**数大小来确定气体所处状态的区域；滑移区与连续介质区域均可用**NS**方程描述。
2. 一直到**10nm**厚度的液体层，微细通道内液体的流动与换热仍然可以采用连续介质的模型。
3. 对于管内沸腾， **$d < 3\text{mm}$** 时容易引起气泡的堵塞，因此**Kandlikar**认为常规管内沸腾的结果不能用于 **$d < 3\text{mm}$** 的通道。

## 4. 微细通道中单相流动与换热造成差别的原因分析:

1. 管子内径测定误差;
2. 进口段的影响;
3. 试验段进口与出口突扩与突缩的影响;
4. 流量不均匀分配的影响;
5. 管子表面粗糙度的影响: 层流1%就有影响; .
6. 稀薄性与压缩性的影响;
7. 液体中可能溶解了气体;
8. 液体粘性的沿程变化;
9. 粘性耗散引起的非等温流动;
10. 液、固间的亲水 (hydrophilic) 与憎水 (hydrophobic) 关系;
11. 微电动效应。

Tao WQ, He YL, Tang GH et al. No new physics in single-phase fluid flow and heat transfer in mini- and micro-channels-is it a conclusion ,MNHT2008-52007

# 流体模型



Ya-Ling He, Wen-Quan Tao, Multiscale simulations of heat transfer and fluid flow problems, ASME J. Heat Transfer, 2012, 134:031018,

## 1.2 基于连续介质假定的传热传质与流动问题数值计算概述

### 1.2.1 常用数值模拟方法

### 1.2.2 实施FVM的基本步骤

### 1.2.3 以FVM为主线的CFD/NHT发展简史

### 1.2.4 常用通用控制方程表达方式的改进

## 1.2.1 常用数值模拟方法

**1. FDM:** 古老，均分网格便于实施任意阶格式，湍流直接模拟采用之；

**2. FVM:** 目前大部分流动传热的商业软件采用之；

对2006，2007两年的NHT (A) 上论文检索的结果，80%以上采用FDM与FVM。

**3. FEM:** 固体力学占优，Adina软件，ANSYS，Zienkiewicz； 冯康

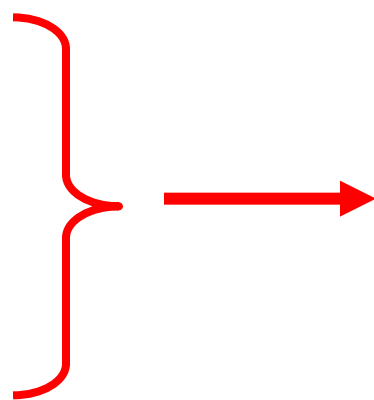
对流固耦合问题按Spalding的观点（2006）仍然以FVM为优。

**4. BEM:** 可以降维，固体力学占优，缺点是要存在基本解；**Brebbia**

**5. FAM:** 实际上是对流项离散额一种绝对稳定的高精度格式，其余部分与**FDM**，**FVM**相同；**陈景仁**

**6. SAM:** 精度高，但不易用于复杂形状的情形。

实施的简易  
概念的明确  
发展的成熟  
应用的广泛



有限容积法占优

## 1.2.2 实施FVM的基本步骤

**1. 物理建模：**从实际问题引入假设得出物理模型。

**2. 数学建模：**提出描述物理模型的控制方程及其相应的初边界条件。

在CFD/NHT领域常将控制方程化成规范形式：

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \text{div}(\rho\phi\vec{U}) = \text{div}(\Gamma_{\phi}^* \text{grad} \phi) + S_{\phi}^*$$

瞬态项

对流项

扩散项

源项

**3. 变量与坐标选择：**以  $\rho$  还是  $p$  为变量；原始变量法还是涡量流函数法；坐标系统。

**4. 网格生成：**规则区域；不规则区域：块结构化，微分方程法网格生成技术，非结构化，边界浸入法。

**5. 方程离散：**关键是对流项的离散。

**6. 边界条件离散：**第2，3类边界条件的离散处理；开口边界条件的处理。

**7. 离散方程求解：算法选择；代数方程求解方法。**

**8. 数值解不确定度分析**

### **1.2.3 以FVM为主线的CFD/NHT发展简史**

**1. 1972年 SIMPLE算法的提出 (I J Heat Mass Transfer)**

**2. 1974年 TTM (Thompson, Thame, Martin) 提出用微分方程生成网格的技术，使FVM, FEM 成为一对弟兄。**

### 3. 1979年:

**(1) Numerical Heat Transfer 创刊, 主编 Minkowycz W J;**

**(2) PHEONICS 第一版问世, 1981年投放市场;**

**(3) Leonard 提出 QUICK 格式。**

**4. 1980年: Patankar 专著出版 Numerical heat transfer and fluid flow**

**5. 80年代末、90年代初:**

(1) 高阶组合格式研究兴起；

(2) 非结构化网格引入**FVM**；

(3) 数值计算结果的不确定度分析引起重视；

(4) 多个商业软件投放市场：

**PHOENICS**;

**FLUENT**;

**FIDAP**;

**CFX**;

**STAR-CD**;

**ANSYS**

(5) 介观和微观层次数值模拟技术的蓬勃发展：

**LBM, DSMC, MDS**

## 1.2.4 常用通用控制方程表达方式的改进

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \text{div}(\rho\phi\vec{U}) = \text{div}(\Gamma_{\phi}^* \text{grad}\phi) + S_{\phi}^* \quad (1)$$

| Equation                    | $\rho$ | $\phi$ | $\Gamma_{\phi}^*$ | $S_{\phi}^*$                               |
|-----------------------------|--------|--------|-------------------|--------------------------------------------|
| Continuity equation         | $\rho$ | 1      | 0                 | 0                                          |
| Momentum eqn. (x direction) | $\rho$ | $u$    | $\mu$             | $\rho f_x - \frac{\partial p}{\partial x}$ |
| Momentum eqn. (y direction) | $\rho$ | $v$    | $\mu$             | $\rho f_y - \frac{\partial p}{\partial y}$ |
| Energy equation             | $\rho$ | $T$    | $\lambda/c_p$     | $S_T/c_p$                                  |

当流体的比热变化比较大时上述形式的能量方程会导致计算结果不满足能量守恒的要求。

### 1.从能量方程出发的分析

二维非稳态对流能量方程的一般形式为：

$$\frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho c_p u T)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho c_p v T)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + S_T. \quad (2)$$

将其写成标准形式 (1)

$$\frac{\partial(\rho T)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u T)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v T)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{S_T}{c_p}$$

$$-\frac{1}{c_p^2} \left[ \rho c_p T \frac{\partial c_p}{\partial t} + \left( \rho c_p u T - \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) \frac{\partial c_p}{\partial x} + \left( \rho c_p v T - \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) \frac{\partial c_p}{\partial y} \right]$$

什么条件下此附加项为零？ (3)

$c_p$  为常数；

下列三项同时为零为零：

$$\rho c_p u T - \lambda \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad \rho c_p v T - \lambda \frac{\partial T}{\partial y} = 0 \quad \text{and} \quad \rho c_p T \frac{\partial c_p}{\partial t} = 0$$

这样的机会很少。

(4)

## 2. 通用程的改进表达式

为编制通用程序的方便，总体上仍然采用式 (1) 的形式，基于上述在式(1)中引入名义扩散系所构建的通用方程的缺陷，采用引入“名义密度”的方法：

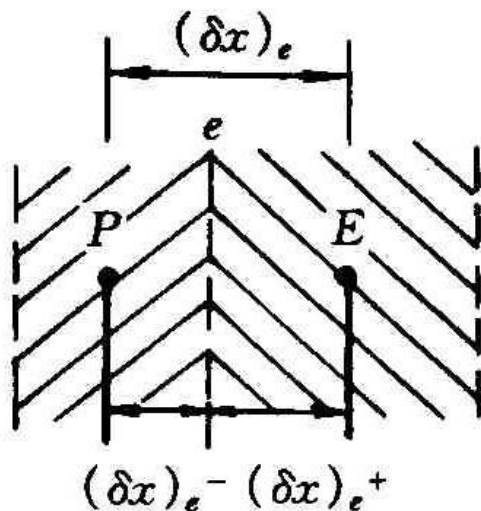
$$\frac{\partial(\rho^* \phi)}{\partial t} + \text{div}(\rho^* \phi \vec{U}) = \text{div}(\Gamma_\phi \text{grad} \phi) + S_\phi^* \quad (5)$$

| Equation                       | $\rho^*$   | $\phi$ | $\Gamma_\phi$ | $S_\phi^*$                                 |
|--------------------------------|------------|--------|---------------|--------------------------------------------|
| Continuity equation            | $\rho$     | 1      | 0             | 0                                          |
| Momentum eqn. ( $x$ direction) | $\rho$     | $u$    | $\mu$         | $\rho f_x - \frac{\partial p}{\partial x}$ |
| Momentum eqn. ( $y$ direction) | $\rho$     | $v$    | $\mu$         | $\rho f_y - \frac{\partial p}{\partial y}$ |
| Energy equation                | $\rho c_p$ | $T$    | $\lambda$     | $S_T$                                      |

实际上就是将原来守恒型的能量方程的  $\rho c_p$  作为通用形式的名义密度：

$$\frac{\partial(\underline{\rho c_p} T)}{\partial t} + \frac{\partial(\underline{\rho c_p} u T)}{\partial x} + \frac{\partial(\underline{\rho c_p} v T)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + S_T.$$

这样的处理比原来将  $\Gamma / c_p$  做为名义扩散系数，将  $S_T / c_p$  做为名义源项要更加自然和方便。



$$\frac{(\delta x)_e}{\lambda_e} = \frac{(\delta x)_{e^+}}{\lambda_E} + \frac{(\delta x)_{e^-}}{\lambda_P}$$

**Harmonic mean**

流固耦合的  
调和平均

$$\frac{(\delta x)_e}{\lambda / c_{pfe}} = \frac{(\delta x)_{e^+}}{\lambda_E / c_{pf}} + \frac{(\delta x)_{e^-}}{\lambda_P / c_{pf}}$$

这种处理方法在稳态问题尚可使用，但对非稳态就无法使用！新形式的方程就不存在这个问题！

## 4. 新型通用方程形式的小结

(1) 新型通用方程引入名义密度，使得能量方程扩散系数和源项 恢复成为自然表达式，无论稳态和非稳态都可很自然地实现流固耦合边界的调和平均方法；

(2) 在教学程序中只要在DENSE模块中引入以下语句

IF (NF .NE. 4) RHO(i ,j)=RHO<sub>given</sub>

IF (NF .EQ. 4) RHO(i, j)=RHO<sub>given</sub>\*CP<sub>given</sub>

并在GAMSOR中对各个变量赋各自的扩散系数即可。

(3) 对湍流的模型，T方程的扩散系数为：

$$c_p \left( \frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right)$$

Li W, Yu B, Wang Y, et al. Communications in Computational Physics, 2012, 12(5):1482-1494

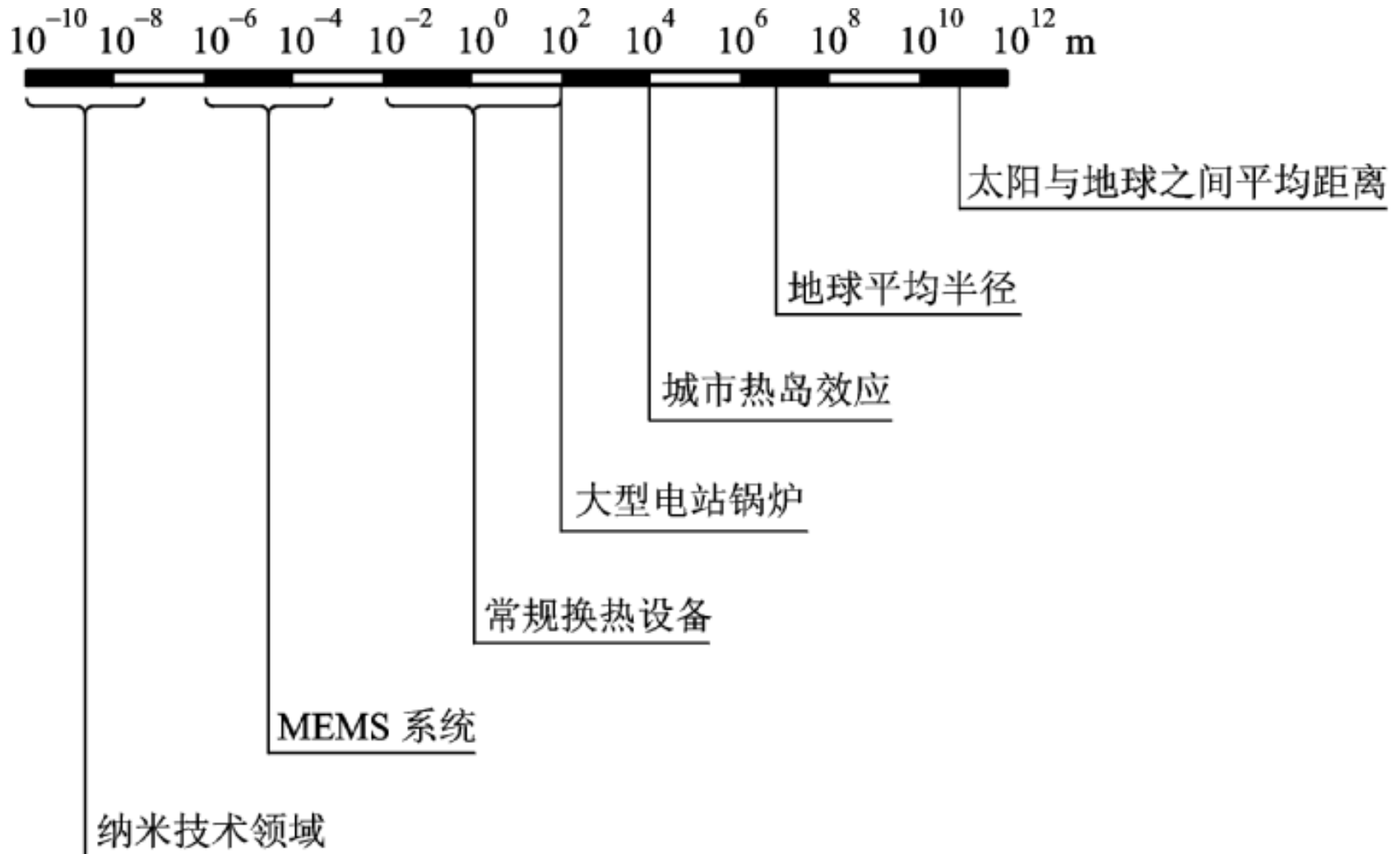
## 1.3 传热传质与流动问题的数值计算的近代发展综述

近年来计算传热学发展趋势与特点如下：

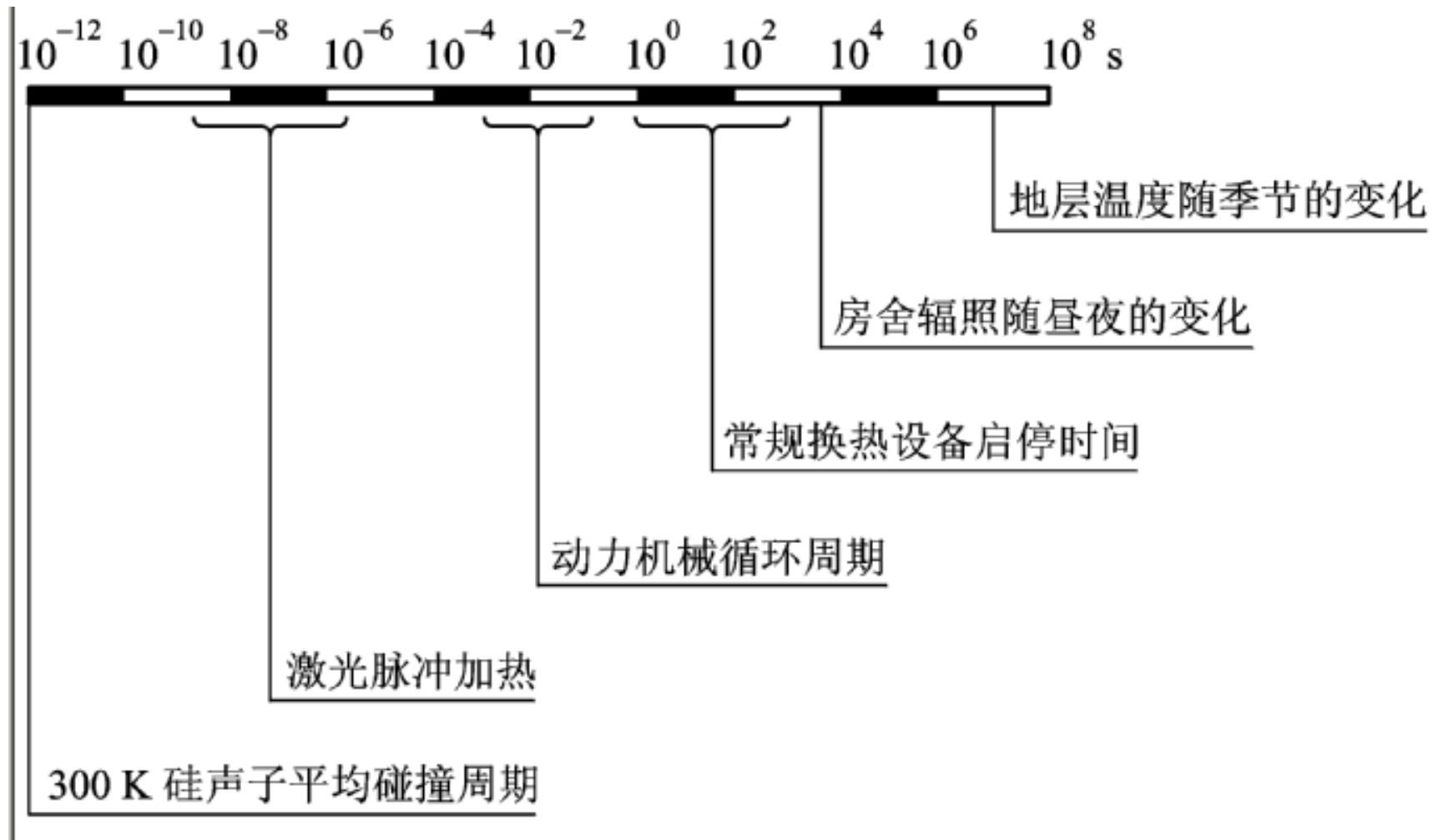
### 1.数值模拟范围大幅度拓宽

介观与微观层次的模拟方法发展迅速，包括LBM，DSMC，MDS。辐射问题的数值计算除了区域法、热流密度法等外，蒙特卡罗法、离散坐标法、有限容积法等应用也日益广泛。传热问题模拟范围的几何与时间尺度大幅度拓宽。

# 空间尺度跨越20个数量级



# 时间尺度也跨越20个数量级



## 2.有限容积方法仍然处于主导地位

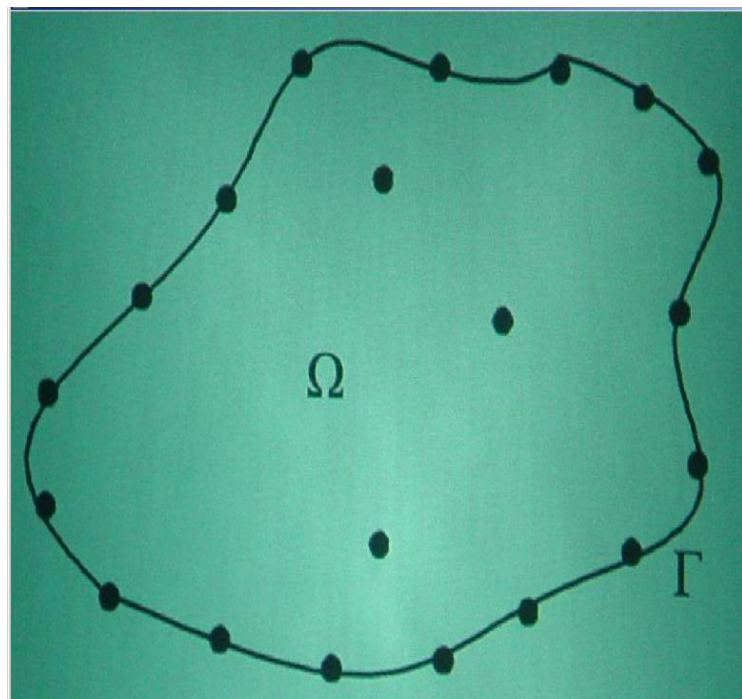
在导热问题中有限元法与边界元法应用较广；但在对流传热问题中有限容积法仍占主导地位。

## 3. 区域离散方法发展迅速

上世纪70年代末提出了采用微分方程以生成节点的方法（适体坐标方法，结构化网格），以后结构化网格从单块发展到多块；80年代后期产生了非结构化网格。近年来出现了直角坐标非结构化网格、单元切割法、浸入边界法等。

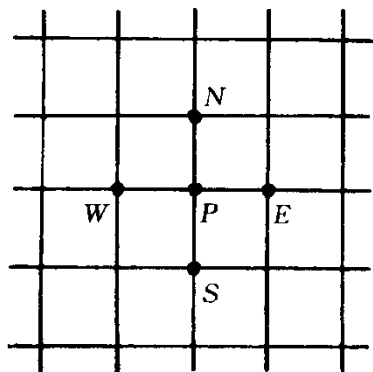
近年来出现了所谓的“无网格方法”(Meshless methods)。它最早应用于固体力学中，先后发展出了光滑粒子流体动力学方法、伽辽金型无网格方法等十几种。

在“无网格方法”中只需要确定计算区域中节点的位置，但不需要各个节点间相互连接的关系。



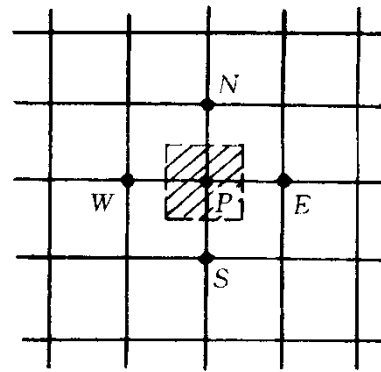
# FDM(a), FVM(b), FEM(c), FAM(d)四种方法

**FDM**



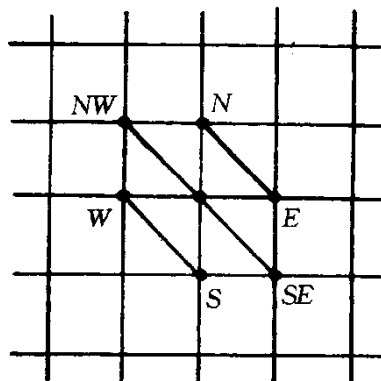
(a)

**FVM**



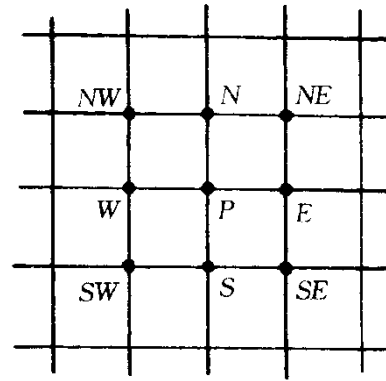
(b)

**FEM**



(c)

**FAM**



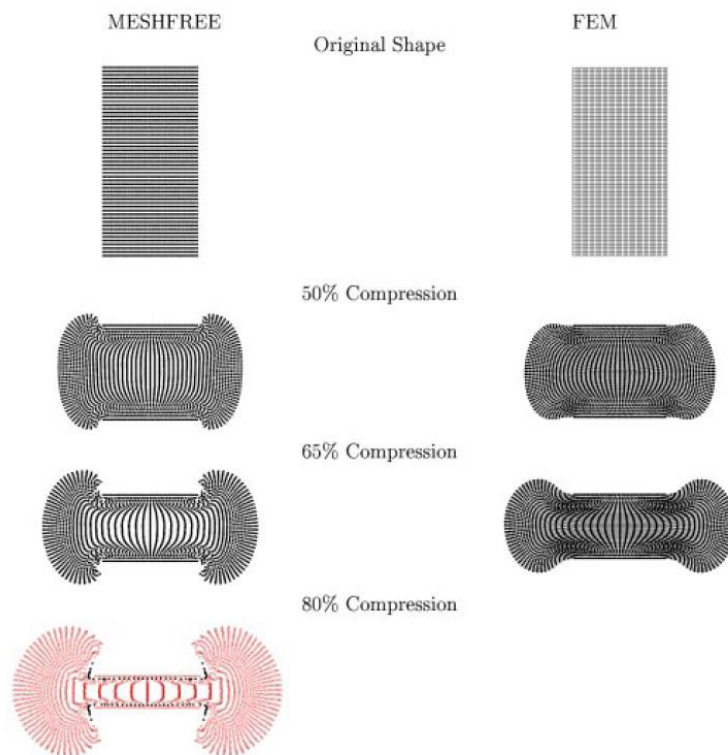
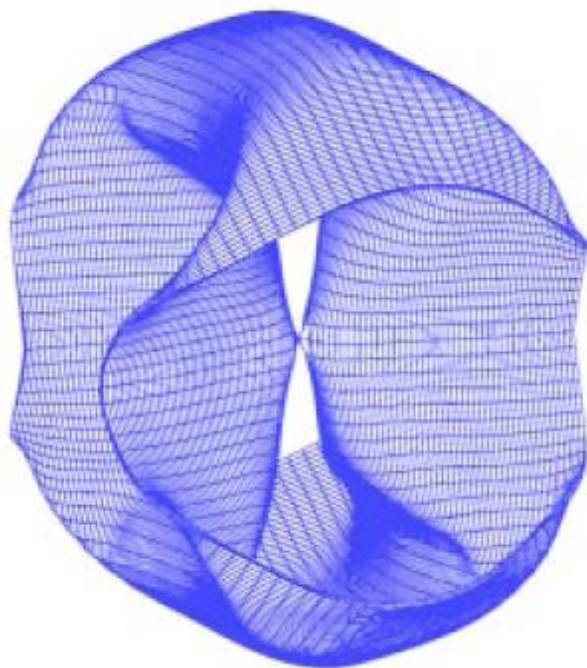
(d)

所有这些方法都需要生成网格： 1) 确定节点的位置； 2) 建立结点之间的相互关系。

所谓建立结点之间的相互关系，就体现在最终对每个节点都要建立起如下的离散方程：

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + a_F \phi_F + a_B \phi_B + b$$

对大变形过程的模拟遇到很大的困难。



## 4. 数值方法改进与高性能计算机应用使模拟更为高效

SIMPLE系列算法已推广到可压缩流动、非正交结构化网格以及非结构化网格上;

能改进该算法中略去邻点影响这一假定的算法, 如CLEAR, **IDEAL**等相继提出;

对离散所形成的速度与压力的代数方程组的先进求解方法 (**克雷洛夫子空间方法**) 或联立求解的方法也会随着计算技术的发展而得到应用。

各种界面扑捉方法的发展与应用: VOF, Level set, VOSET, 等。

并行计算与超级计算机在传热与流动问题中的应用逐渐普遍而且超级计算机运算速度突飞猛进。

2008年5月美国Los Alamos国家实验室的超级计算机持续运行计算性能达到1.026PFlops (浮点运算速度超过了一千万亿次/秒 ), 2009年11月世界排名500强有2台持续性能超过1PFlops, 我国国防科大研制的“天河1号”峰值为1.2PFlops, 位列2009年500强的第5。从此世界和我国计算机性能领域进入千万亿次的时代。

## 2010年世界**TOP500**超级计算机

| 排名 | 制造商  | 总核数                | 峰值/实测性能                     |
|----|------|--------------------|-----------------------------|
| 1  | Cray | AMD<br>224162      | 2331万亿次<br><b>1759万亿次</b>   |
| 2  | 中国曙光 | Intel<br>120640    | 2984.3万亿次<br><b>1271万亿次</b> |
| 3  | IBM  | OpteronDC<br>12240 | 1375.8万亿次<br>1042万亿次        |
| 4  | Cray | AMD<br>98920       | 1028.9万亿次<br>831.7万亿次       |
| 5  | IBM  | PowerPC<br>294912  | 1002.7万亿次<br>825.5万亿次       |

**PFLOPS=1000**万亿次

## 2011年11月世界**TOP500**超级计算机

| 排名 | 安装地        | 制造商          | 功率<br>(kW) | 峰值/实测性能                    |
|----|------------|--------------|------------|----------------------------|
| 1  | 日本理化所      | 日本富士通        | 12659.9    | 11280.38万亿次<br>10510.00万亿次 |
| 2  | 天津国家超级     | 中国国防科大       | 4040.00    | 4701.00万亿次<br>2566.00万亿次   |
| 3  | 橡树岭国实室     | Cray 公司      | 6950.00    | 2331.00万亿次<br>1759.00万亿次   |
| 4  | 深圳家<br>国超级 | 曙光公司         | 2580.00    | 2984.30万亿次<br>1271.00万亿次   |
| 5  | 东京工大       | NEC/HP<br>公司 | 1398.60    | 2287.63万亿次<br>1192.00万亿次   |

## 2014年11月世界**TOP500**超级计算机

| 排名 | 安装地                   | 制造商                  | 功率<br>(MW) | 峰值/实测性能              |
|----|-----------------------|----------------------|------------|----------------------|
| 1  | 广州超级<br>计算中心          | 天河2号<br>国防科大<br>2013 | 17.80      | 54900万亿次<br>33860万亿次 |
| 2  | 美国能源部<br>橡树岭国家<br>实验室 | Cray<br>2012         | 8.21       | 27110万亿次<br>17590万亿次 |
| 3  | 美国能源部<br>劳伦斯国家<br>实验室 | IBM2012              | 7.89       | 20130万亿次<br>17170万亿次 |
| 4  | 日本理化研<br>究所           | Fujitsu<br>2011      | 12.7       | 11280万亿次<br>10510万亿次 |
| 5  | 美国能源部<br>阿贡国家实<br>验室  | IBM2012              | 3.95       | 10060万亿次<br>8590万亿次  |

## 2016年11月世界**TOP500**超级计算机

| 排名 | 安装地                       | 制造商                  | 功率/MW | 峰值/实测性能                       |
|----|---------------------------|----------------------|-------|-------------------------------|
| 1  | 无锡超级<br>计算中心              | 神威太湖之<br>光           | 15.37 | 125.43 <b>PFLOPS</b><br>93.01 |
| 2  | 广州超级<br>计算中心              | 天河2号<br>国防科大<br>2013 | 17.80 | 54.90<br>33.86                |
| 3  | 美国能源<br>部橡树岭<br>国家实验<br>室 | Titan/Cray           | 8.21  | 27.11<br>17.59                |
| 4  | 美国能源部<br>劳伦斯国家<br>实验室     | Sequoia/<br>IBM      | 7.89  | 20.13<br>17.17                |
| 5  | 美国国家能<br>源研究中心            | Cori/Cray            | 3.94  | 27.88<br>14.01                |



广州超级计算中心-天河2号

第44届世界超级计算机500强排行榜，“天河二号”连续四次位居榜首。这样的“第一”依赖的是数万颗国外处理器芯片的支撑。天河二号使用了32000颗“Xeon”处理器和48000颗“Xeon Phi”协处理器。

## 5. 对流项离散格式的改进促使计算精度的提高

1979年提出的**QUICK**格式和其后分析格式的正规变量法，使有限容积法中对格式的研究从Patankar的总结上升到一个新的高度，QUICK格式得到广泛应用。

但格式的精度与稳定性之间的矛盾未能较好解决。2002年提出的SGSD格式部分协调了这一矛盾，最近提出的“**对称奇阶**” (Symmetry and Odd-order) 格式有望更好解决这一问题。

## 6. 对数值模拟结果进行不确定度分析渐成共识

随着数值模拟应用范围的迅速扩大，如何分析计算结果的不确定度成为关注的焦点。建立公认的数值模拟误差分析方法是今后研究内容之一。

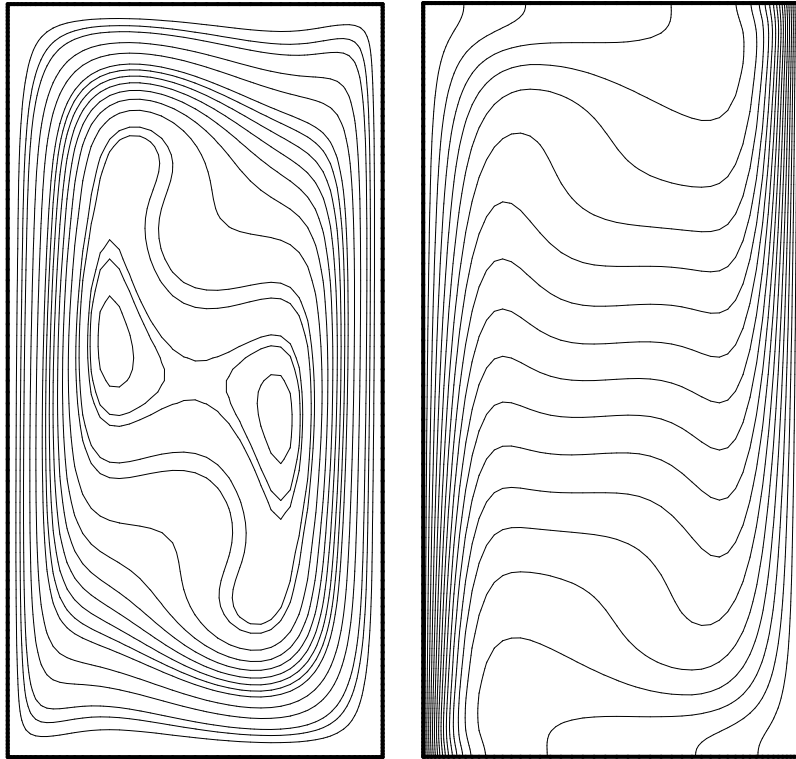
## 7. 工程应用范围进一步拓宽并与实时控制相结合

将数值模拟与部分实验验证相结合已经成为普遍接受的方法。

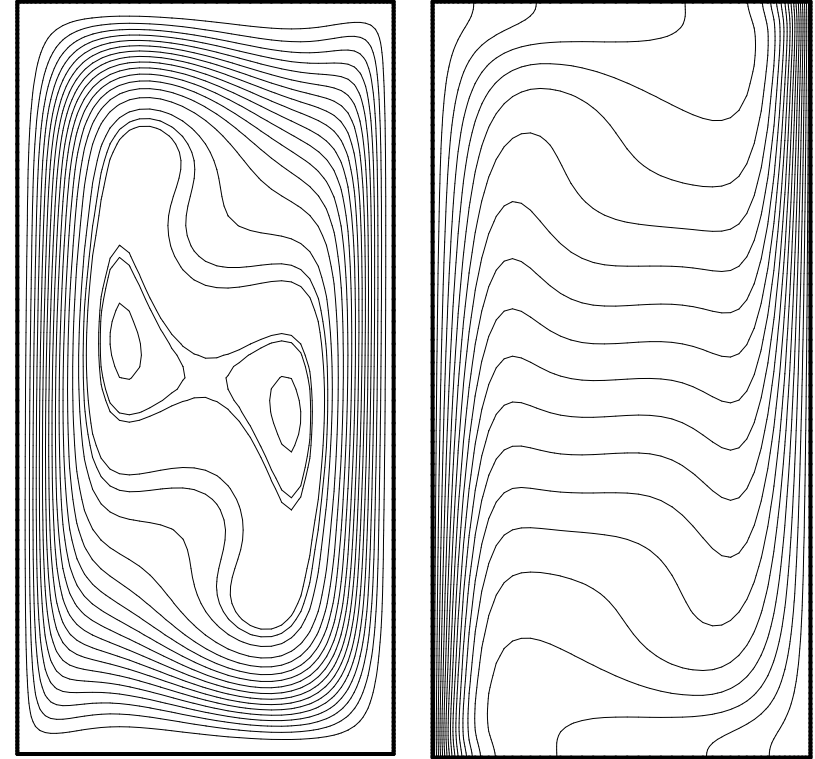
目前的硬件水平还不能将场模拟的结果直接于生产过程的实时控制，应用本征正交分解方法

（Proper Orthogonal Decomposition, POD）有望解决这一困难，是计算传热学应用的一个方向。

$Ra=168800$



**FVM solution**



**POD solution**

**Comparisons of temp. & streamfunction for  $Ra=16800$**

## Comparison of computation time between SIMPLE and POD technique (seconds)

| <b>Rayleigh number</b>   | <b>8950</b>   | <b>17000</b>  | <b>85700</b>  | <b>168800</b> |
|--------------------------|---------------|---------------|---------------|---------------|
| <b>SIMPLE</b>            | <b>137.36</b> | <b>131.08</b> | <b>117.96</b> | <b>116.09</b> |
| <b>POD with 1 mode</b>   | <b>1.42</b>   | <b>1.38</b>   | <b>1.50</b>   | <b>1.53</b>   |
| <b>POD with 5 modes</b>  | <b>1.45</b>   | <b>1.49</b>   | <b>1.53</b>   | <b>1.49</b>   |
| <b>POD with 10 modes</b> | <b>1.53</b>   | <b>1.56</b>   | <b>1.56</b>   | <b>1.56</b>   |

宇波著. 流动与传热数值计算若干问题的研究与探讨. 北京: 科学出版社, 2015

## 8.商业软件的应用日趋普及并形成市场

目前国外市场上已有计算传热学软件60多个。软件市场几乎均为国外产品，如何组织我国各方面的力量开发具有自主知识产权的大型计算软件是一件亟待解决的问题。

随着商业软件应用的逐渐扩大，在计算流体与计算传热应用领域出现一种“泛化”倾向：

- 1) 只是像使用一台仪器那样操作“开”“关”而对数值处理的内容不求甚解；
- 2) 对数值计算结果只是作一些现象性的描述而却未从物理机制的分析。

## 9. 多尺度、跨尺度计算兴起

传热现象中的多尺度问题可大别为两类：过程多尺度与系统多尺度。

质子交换膜燃料电池中反应气体流动与扩散尺度经历了3~4个数量级。

数据处理中心的散热是系统多尺度问题，从机房冷却气流组织到芯片冷却，尺度差几个数量级；但从机房气流的组织到芯片的气流冷却都可以用NS方程和能量方程来描写。

## 10.未来十年百亿亿次计算机的出现将促使以实验数据为依据的设计向大规模科学计算为设计依据方向转变（**设计依据的转型！**）

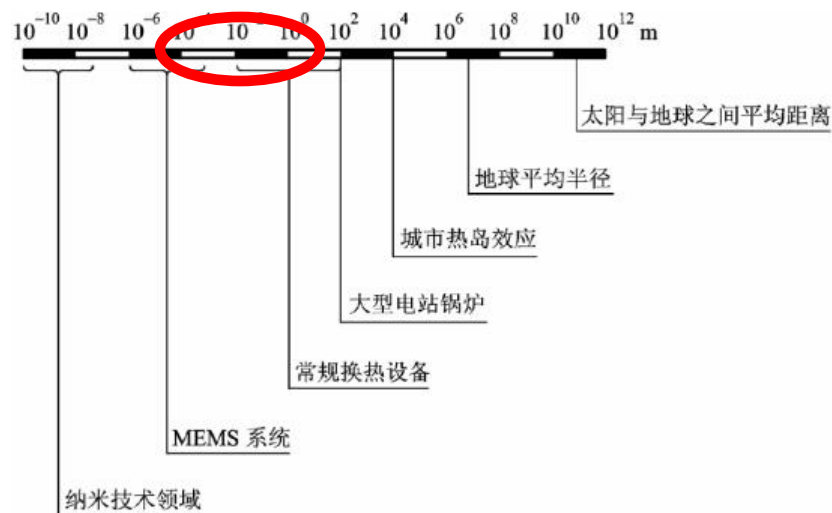
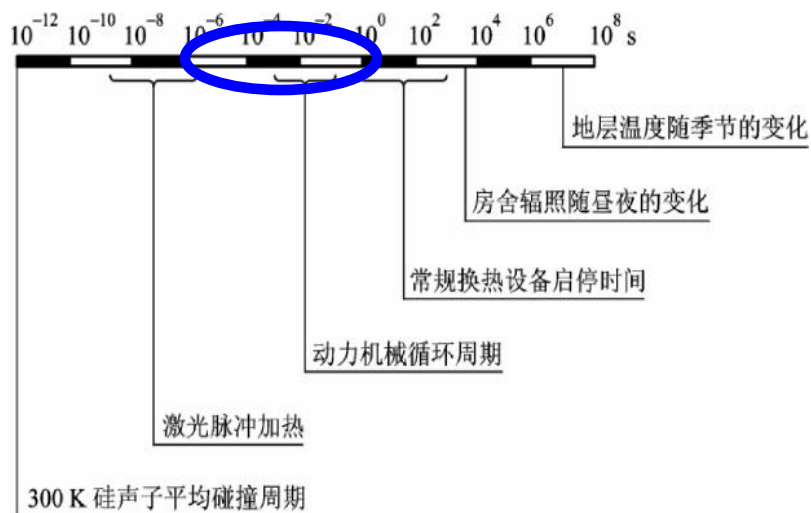
目前国际计算机硬件制造商和超级计算机专家正在构划 E-级计算机（**Exascale computing**）——百亿亿次超级计算机，估计十年之内可以制造出来；它的出现与应用将会使工程领域的设计发生根本性的变化——从主要依据实验到主要依据数值模拟！

对我国，这样时刻的到来虽然要迟后一大段时间，但是这样的发展趋势是必然的！

## 1.4 流动与传热传质问题的多尺度数值模拟简介

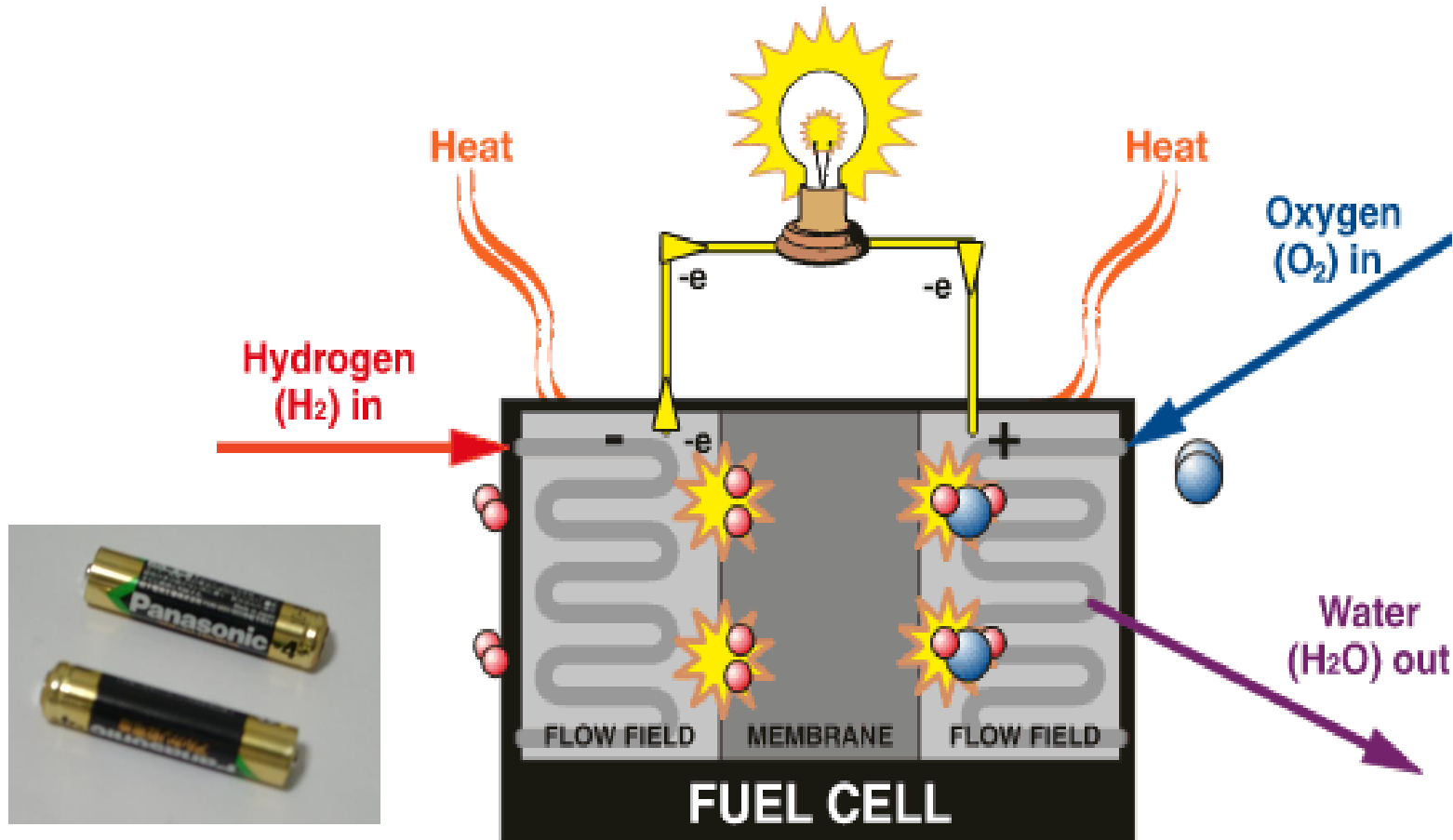
**概念：**自然界及工程领域中的许多流动和传热现象常常发生在 涵盖几个数量级的几何空间以及时间范围内，统称为**多尺度物理现象**。

### 时间多尺度与空间多尺度

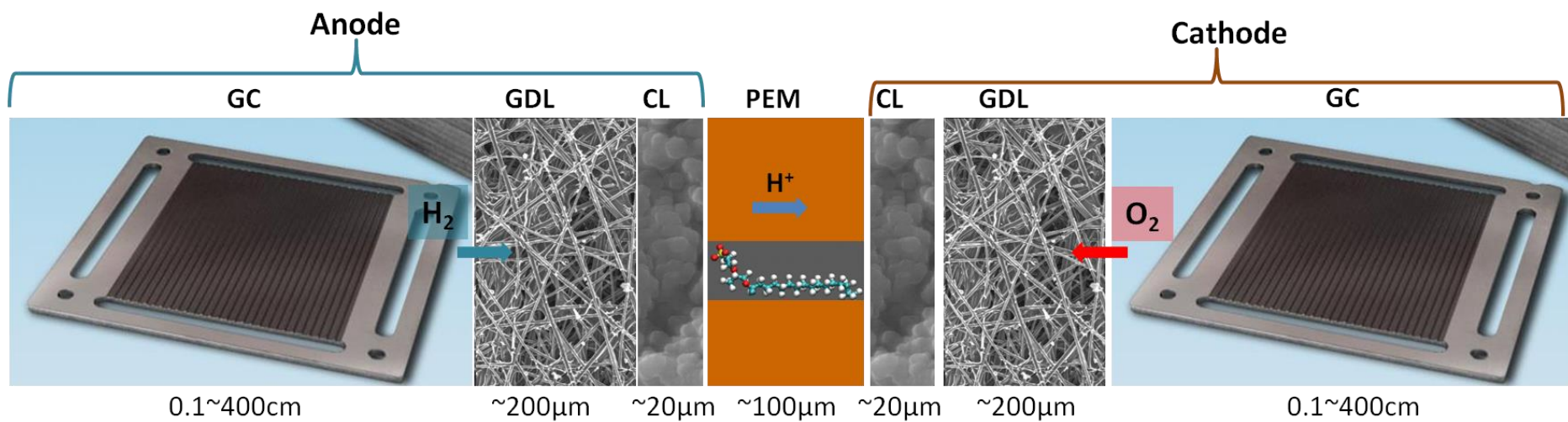


## 1.4.1 能源与环境领域中的多尺度问题

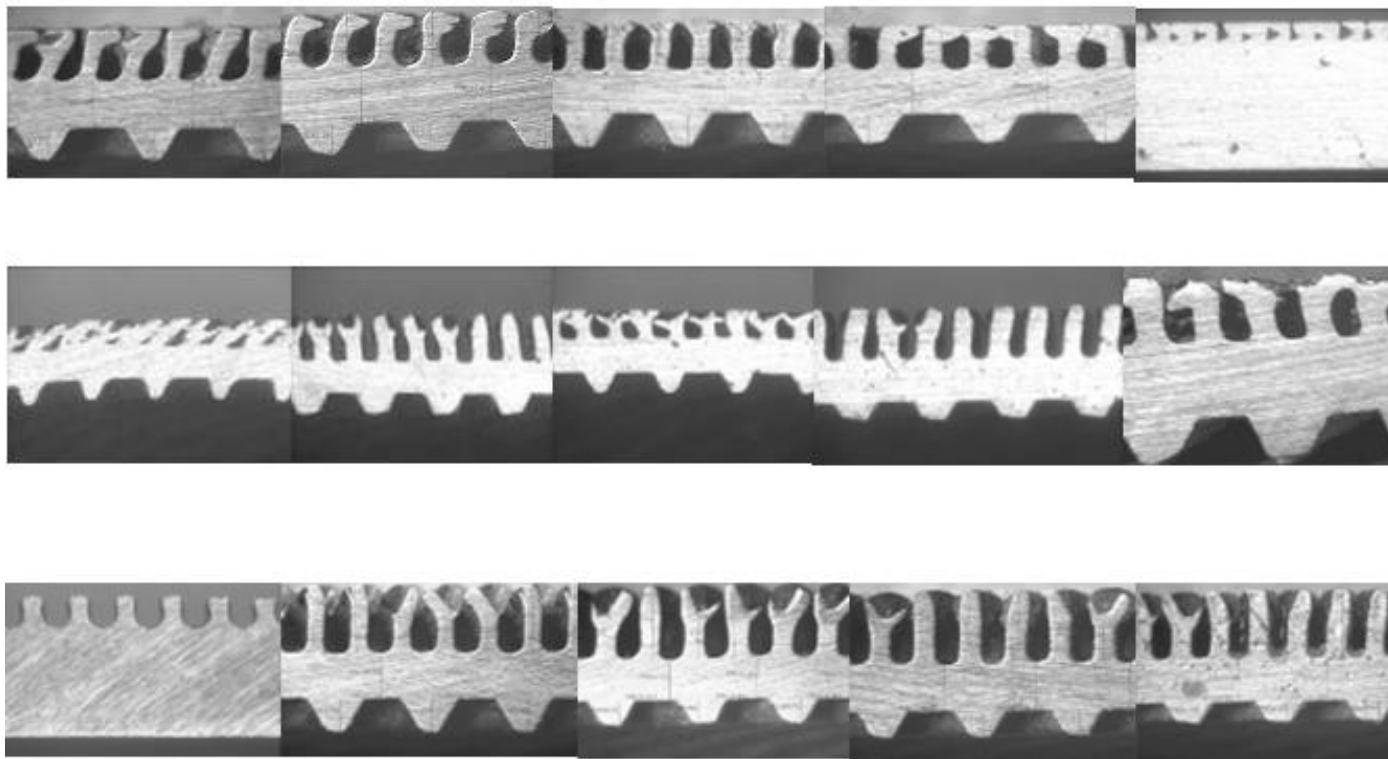
### 例 1 — 燃料电池中的传递与化学反应过程



质子交换膜燃料电池（PEMFC）的电化学过程动画图



## 例2 凝结相变换热过程



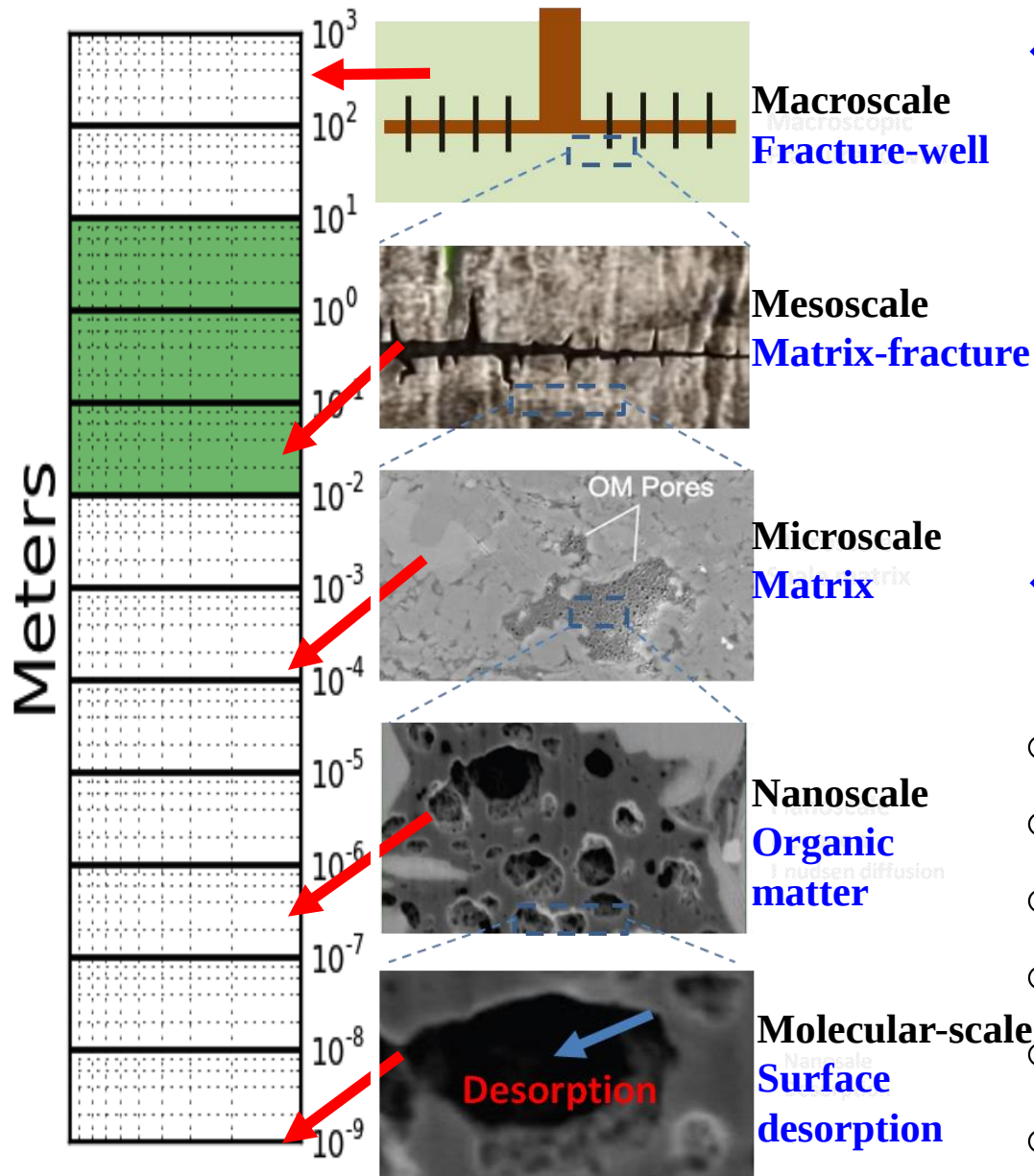
凝结和沸腾是**纳米量级**上的现象，而生成物的流动则是**宏观尺度**上的过程。

## 例3 数据中心机房的冷却



从整个机房冷却气流的合理组织到**机柜、刀片服务器、封装以及芯片**的冷却, 几何尺度经历了近十个数量级的变化。

# 例4 页岩气(Shale gas)的开采过程

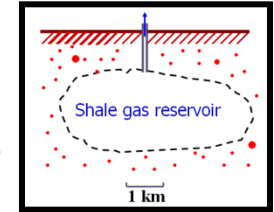
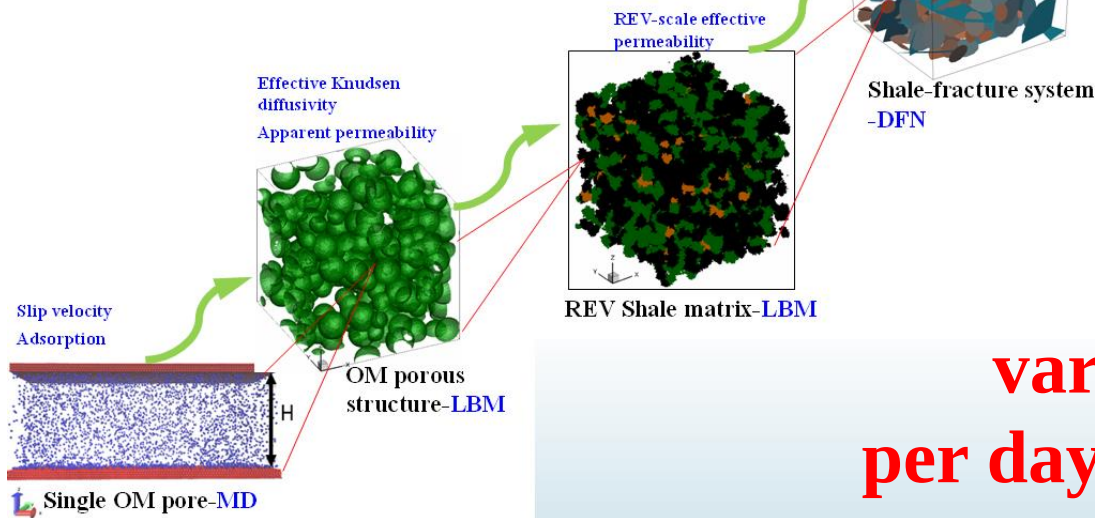


❖ **Multiscale** - From gas desorption at surface of nanopores ( $\sim 10^{-9}\text{m}$ ), to macroscale gas migration ( $\sim 10^3\text{m}$ ), length scale covered is about **12** magnitudes

❖ **Multiple physic-chemical processes**

- desorption/adsorption
- surface diffusion
- Knudsen diffusion
- slip flow
- Darcy flow
- Particle flow

By multi-step up-scaling method, we may finally relate the shale gas behavior in nano-pores with the up most scale---gas reservoir



**Then we may be able to predict the variation of shale-gas per day output with time!**

## 1.4.2 传热与流动多尺度问题分类

### 多尺度过程

微观、介观和宏观尺度物理过程**紧密**相关，但不同尺度有不同控制方程。

如：质子交换膜燃料电池中流动传质过程。

### 多尺度系统

大尺度和小尺度现象**都服从统一的控制方程**。

如：数据处理中心的用空气冷却电子器件，含煤粉颗粒群的气流流动。

## 1.4.3 传热与流动多尺度问题数值求解方法

### 多尺度系统

分层计算、逐级细化方法：自顶向下，自低向上；  
或采用尺度发生几个数量级变化的网格（局部加密）

### 多尺度过程

#### 统一建模、整场计算方法

用**Boltzmann**方程计算从连续介质流到稀薄气体流。

### 分区计算、界面耦合方法

结合宏观方法的高效性与介观、微观对界面及局部细节捕捉的精确性，目前应用最广。

# 能源与环境工程中的多尺度问题的数值求解方法

多尺度过程

多尺度系统

分区求解、界面耦合

分区求解、尺度提升

全场整体统一求解

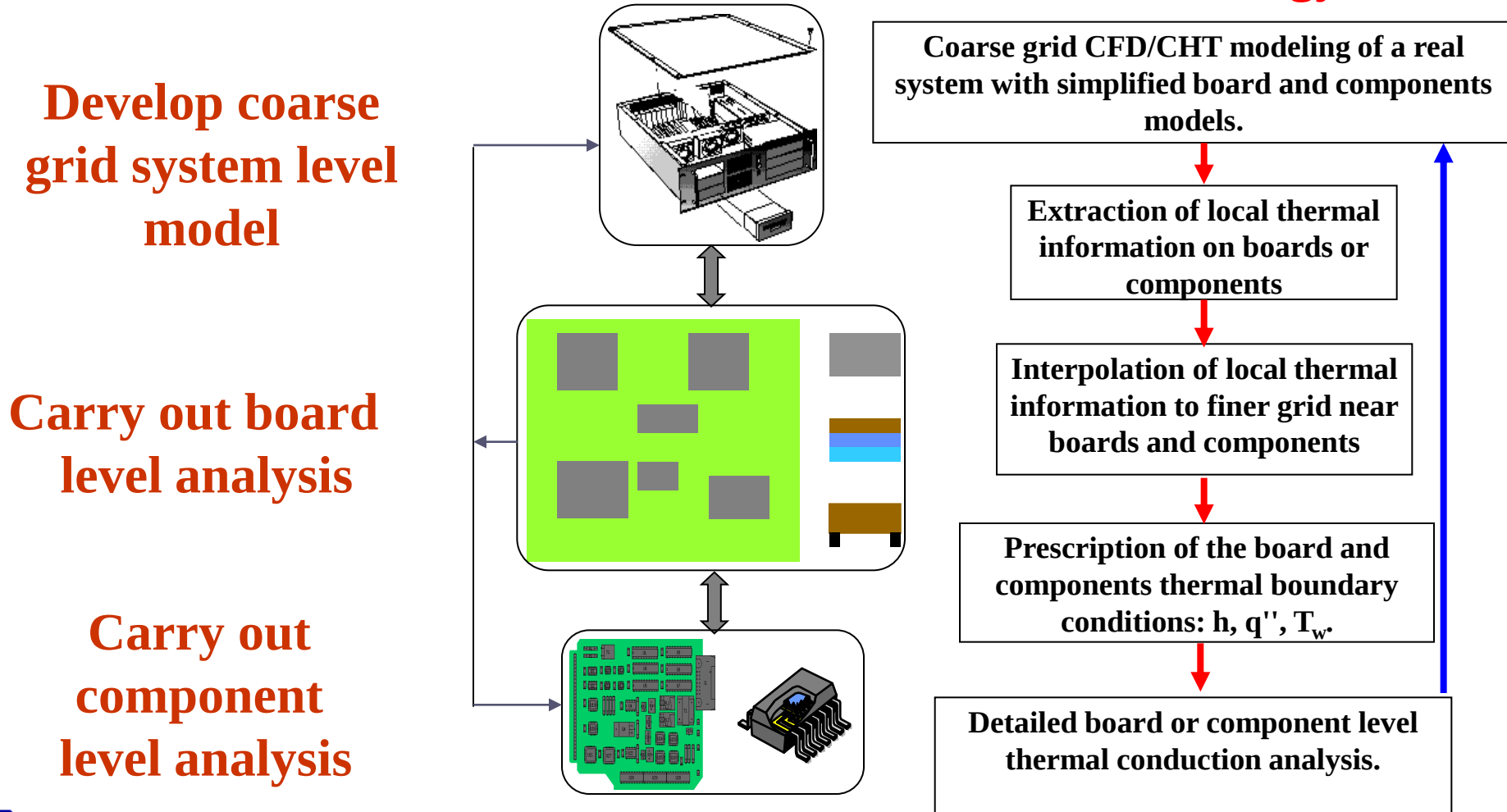
全场用统一方程描写

第一层全场网格选取

从顶到底、逐级细化

# 1.4.4 多尺度系统的分层求解逐级耦合方法

## Methodology



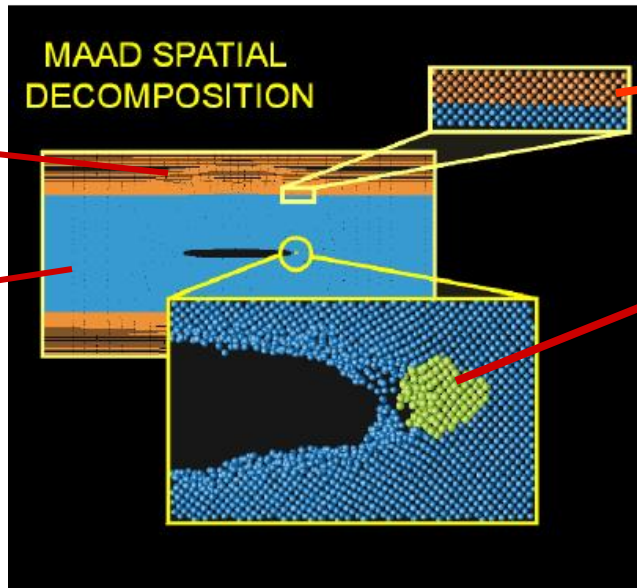
## 1.4.5 多尺度过程的分区计算、界面耦合方法

整个求解区域分成几个区域，各分区采用最适合的数值模拟方法，在**分区界面上交换信息**。

在界面上信息交换方式称为耦合算子（公式算子与组合算子），建立耦合算子是分区计算，界面耦合方法的**核心**。从微观到宏观参数的传递称为**压缩算子**；从宏观到微观参数的传递称为**重构算子**，构建较难，公式型重构算子的构建更难。

耦合算子构造原则：意义明确、算法稳定、计算高效和容易实施。

# 材料科学多尺度问题的分区计算、界面耦合典型例子



FE

MD

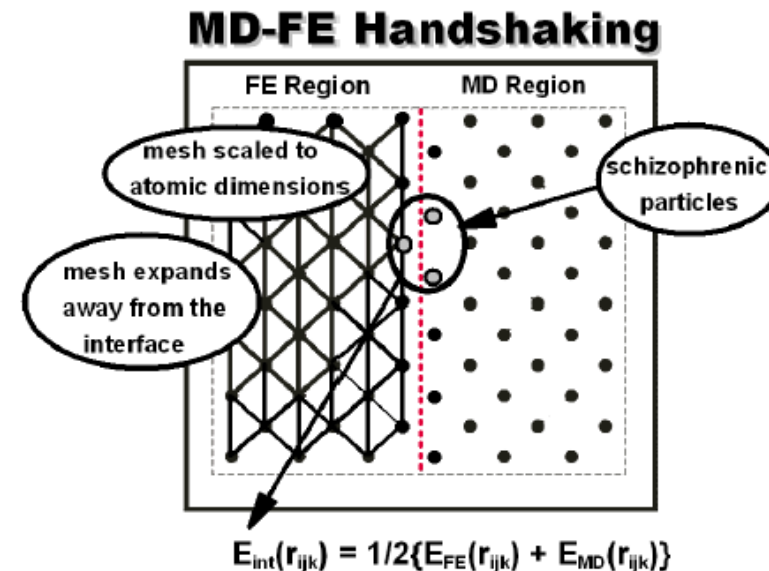
交界处FE-MD

交界处 MD-TB

界面处信息耦合传递

## 硅材料裂缝的跨尺度模拟

Abraham F F. Dynamically spanning the length scales from the quantum to the continuum. International Journal of Modern Physics C, 2000. 11(6):1135—1148



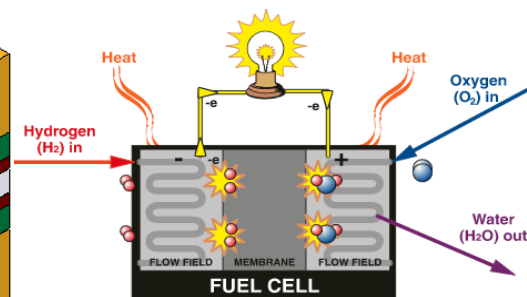
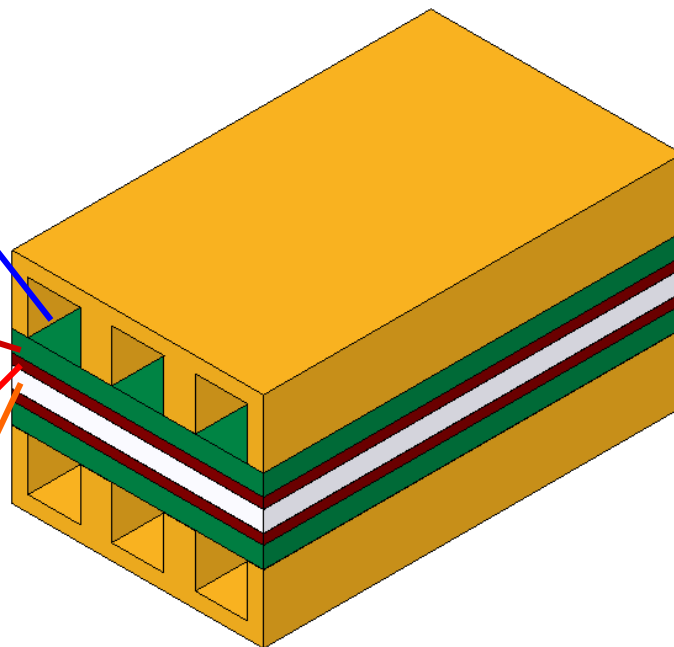
# 对 PEMFC 完全的多尺度计算:

流场板中的  
流动用  
FVM

气体扩散层  
中用LBM

催化剂层用  
MDS

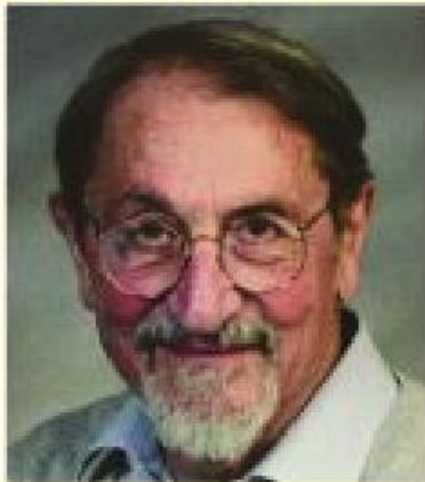
膜中的传递  
用MDS



在界面上进行信息耦合。现在的  
计算机资源和数值方法还无法实现!

## 1.4.6 研究多尺度问题的关键和基本目的

### 2013 Nobel Prize in Chemistry



**Martin Karplus**  
Harvard U.,



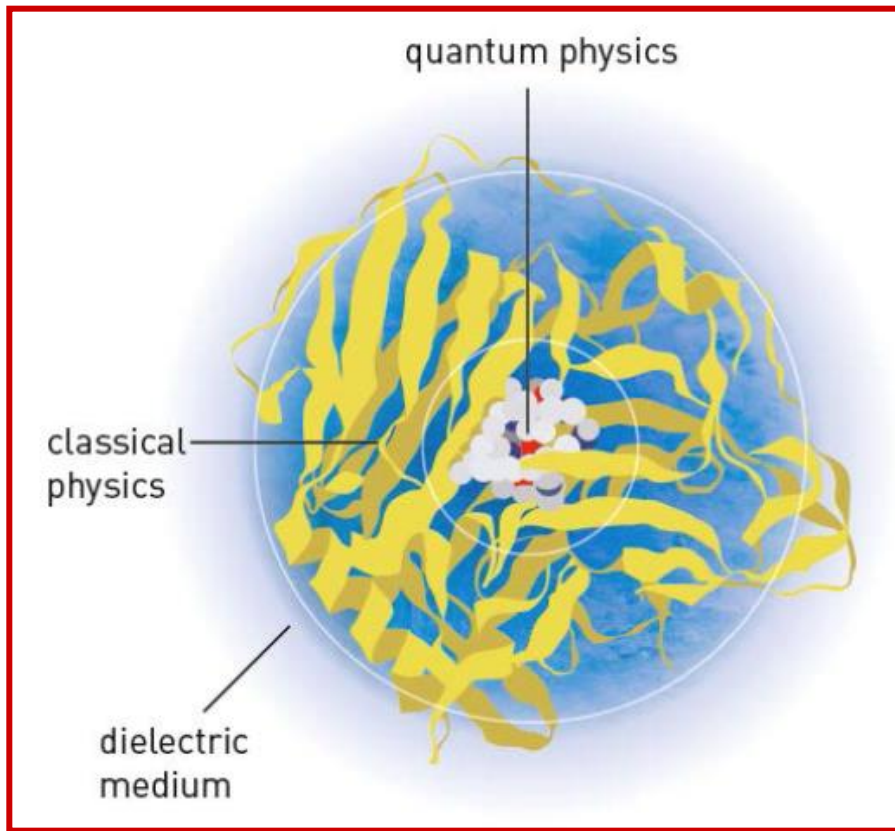
**Michael Levitt**  
Stanford U.,



**Arieh Warshel**  
U. Southern Ca.

**For**

**“Development of Multiscale Models for Complex Chemical Systems”**



**They used both classical and quantum mechanical theory to model large complex chemical systems and reactions**

**In the quantum chemical model the electrons and the atomic nuclei are the particles of interest.**

**In the classical models atoms or groups of atoms are the particles that are described. The classical models contain much fewer degrees of freedom and they can be simulated much faster by computer.**

The key accomplishment was to show how the two regions in the modeled system can be made to interact in a physically meaningful way.

**From Website: Royal Swedish Academy of Science, 2013-10-09**

## **key and goal**

The key and goal of multiscale simulation is to appropriately, in a physically meaningful way , combine macroscale, mesoscale and micro/nanoscale methods to reveal physical mechanism in depth and to provide guidance for engineering design which can not be obtained from single scale simulation.

# 同舟共济 渡彼岸！

People in the same  
boat help each  
other to cross to the  
other bank, where....

