

УДК 532.5.013

© С. И. Мартыненко

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОМАСООБМЕНА В ДИСКОНТИНУАЛЬНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

В статье выполнен теоретический анализ основополагающих уравнений, выражающих фундаментальные законы сохранения в континуальном и дисконтинуальных приближениях, и методов решения задач гидродинамики как одного из важнейших подразделов механики сплошных сред. Данная работа является попыткой более точно описать физико-химические макропроцессы. Показано, что для компьютерного моделирования больше всего подходят уравнения, которые выражают законы сохранения при естественных ограничениях на минимальные пространственный и временной масштабы, то есть уравнения без частных производных и ограничений на гладкость решений. На примере уравнений неразрывности и теплопроводности, приведен феноменологический способ построения и численного решения основополагающих уравнений, и сравнение с традиционным подходом.

Ключевые слова: сплошная среда, число Кнудсена, феноменологический подход, математическое моделирование, теплообмен.

DOI: [10.35634/vm240109](https://doi.org/10.35634/vm240109)

Введение

Основу математического моделирования физико-химических процессов составляет триада академика А. А. Самарского «модель–алгоритм–программа» [1]. В настоящее время основной объем исследований в области математического моделирования приходится на совершенствование моделей отдельных физико-химических процессов, развитие высокоточных численных методов и построение параллельных вычислительных алгоритмов на основе различных технологий распараллеливания [2–5]. Одним из важнейших как с теоретической, так и с инженерной точек зрения, подразделов механики сплошных сред является гидродинамика, которая имеет длительную и интересную историю [6]. В данной работе будет рассмотрена эволюция уравнений механики сплошных сред на примере уравнений Навье–Стокса — основных уравнений гидродинамики.

В истории гидродинамики можно выделить три основных периода: аналитический, переходный и вычислительный в зависимости от используемых методов решения основополагающих уравнений. Основной целью ученых-механиков в аналитический период гидродинамики (XVII век – первая половина XX века) являлся вывод и анализ основополагающих уравнений, верификация их решений на основе имеющихся экспериментальных данных и применение полученных результатов к решению инженерных задач. Следует помнить, что математический аппарат того времени состоял из дифференциального и интегрального исчисления, что приводило к необходимости принятия допущений, противоречащих физическим основам изучаемых процессов. Поэтому главным допущением являлась гипотеза сплошности, согласно которой жидкость или газ заменяли непрерывно распределенной по пространству фиктивной сплошной средой (континуумом), обладающей в макромасштабах физическими свойствами реальной жидкости или газа [7, 8]. Любая часть континуума считается континуумом, поэтому все функции, используемые для описания движения континуума, должны быть достаточно гладкими для последующего применения дифференциального

исчисления. Другими словами, континуум игнорирует молекулярное строение материи, поэтому в рамках данного приближения невозможно без дополнительных допущений описать процессы, которые имеют квантовую природу (например, химические реакции).

С физической точки зрения, наиболее наглядным выводом основополагающих уравнений является запись законов сохранения массы, импульса, энергии и др. функций, характеризующих континуум, применительно к произвольному конечному объему в потоке жидкости или газ. Как правило, недостающие связи между отдельными функциями восполняют на основе феноменологических законов. Полученный закон сохранения справедлив только для данного конечного объема, поэтому стягивание объема в точку приводит к дифференциальным уравнениям в частных производных, не зависящих от конфигурации конечных объемов [9]. Например, уравнения Навье–Стокса, описывающие течение вязкой сжимаемой среды, имеют вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0, \quad (0.1a)$$

$$\frac{\partial(\rho \vec{V})}{\partial t} + (\rho \vec{V} \cdot \nabla) \vec{V} = -\nabla p + \eta \Delta \vec{V} + \left(\zeta + \frac{\eta}{3} \right) \nabla \operatorname{div} \vec{V}, \quad (0.1b)$$

где t — время, ∇ — оператор набла, Δ — векторный оператор Лапласа, η — коэффициент динамической вязкости, ζ — «вторая вязкость», ρ — плотность, p — давление, $\vec{V} = (v^1, \dots, v^n)$ — векторное поле скорости, \vec{f} — векторное поле массовых сил. Незвестные функции p и \vec{V} являются функциями времени t и координаты $x \in \Omega$, где $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $n = 2, 3$, — область, в которой движется жидкость или газ.

Впервые уравнения Навье–Стокса были получены Навье (несжимаемая жидкость, 1822) и Пуассоном (сжимаемая жидкость, 1829), которые исходили из модельных представлений о молекулярных силах. Позже феноменологический вывод уравнения был дан Сен-Венаном и Стоксом. Хотя уравнения Навье–Стокса известны давно, до сих пор остаются нерешенными следующие математические и физические проблемы.

А. Математическая проблема состоит в доказательстве существования решений уравнений Навье–Стокса. Теоретическая и прикладная значимость объясняется включение уравнений Навье–Стокса в число проблем тысячелетия: ее официальное описание на сайте Института Клэя состоит из четырех отдельных задач, решения любой из них будет достаточно для получения приза.

Б. Физическая проблема состоит в трактовке физического смысла уравнений и их решений. Согласно традиционному подходу уравнения Навье–Стокса описывают жидкость или газ в континуальном приближении, то есть как бесконечно делимую субстанцию, игнорируя дискретность молекулярной структуры жидкости в микромасштабе. Поэтому не совсем понятно, какую погрешность вносит континуальное приближение в математическое описание движения реальной жидкости или газа. Естественно, предпринимаются многочисленные попытки предложить поправки к уравнениям Навье–Стокса для достаточно больших значений числа Кнудсена (Kn) [10–14].

В настоящее время точные решения уравнений Навье–Стокса (0.1) известны для простейших задач в силу ограниченных возможностей аналитических методов их решения (дифференциального и интегрального исчисления). Переходный период гидродинамики (вторая первая половина XX века — настоящее время) характеризуется сменой математического аппарата, то есть известные уравнения Навье–Стокса (0.1) стали решать новыми (численными) методами при помощи быстродействующих компьютеров. Поэтому с появлением в середине прошлого века первых компьютеров стало формироваться новое направление гидродинамики — вычислительная гидродинамика (CFD: Computational Fluid Dynamics), це-

лью которой стало решение уравнений Навье–Стокса (0.1) более универсальными, но приближёнными численными методами. Для этого (начально-)краевую задачу для уравнений Навье–Стокса (0.1) заменяют на более простую алгебраическую задачу (при использовании глобальной линеаризации — на систему линейных алгебраических уравнений), решение которой в отдельных точках области Ω близко к решению исходной дифференциальной задачи.

Построение дискретного аналога (начально-)краевой задачи для уравнений Навье–Стокса потребовало решения ряда математических проблем: разработки экономичных алгоритмов построения (адаптивных) сеток в областях со сложной геометрией, совершенствования методов (конечно-объемной или конечно-элементной) аппроксимации (начально-)краевых задач на построенных сетках, исследования устойчивости, сходимости и аппроксимации разностных схем, разработки эффективных итерационных методов для сегрегированного или совместного решения систем нелинейных алгебраических уравнений (зачастую седлового типа), эффективного распараллеливания вычислений и т. д. К нерешенным проблемам непрерывных уравнений Навье–Стокса (0.1) (существование, единственность и гладкость решений) добавились аналогичные проблемы для их дискретных аналогов, а также априорный и апостериорный анализ погрешности, вызванный заменой дифференциальной задачи на алгебраическую (сеточную). Кроме того, необходимо было доказать сходимость итерационных методов решения результирующих алгебраических уравнений.

Разработка новых вычислительных технологий велась преимущественно в США и СССР в 1950–1960-х годах для создания оружия массового уничтожения и средств его доставки. Секретность исследований существенно ограничивала возможность опубликования разработанных численных методов и проведения международных конференций. Только в 1978 году выдающийся английский ученый Брайан Сполдинг (Brian Spalding) задумал создание открытого кода вычислительной гидродинамики PHOENICS, способного обрабатывать все процессы, связанные с течением жидкости или газа.

Первоначальное создание PHOENICS было в значительной степени работой Сполдинга и Харви Ростена (Harvey Rosten) и привлекло широкое внимание во всем мире по следующим причинам: 1) используемые численные методы были подробно и популярно представлены Сухасом Патанкар (Suhas Patankar) [15, 16]; 2) описание пакета PHOENICS в отличие от кодов, разработанных в закрытых исследовательских центрах, находилось в свободном доступе и было доступно для широкого круга пользователей.

Следует заметить, что Б. Сполдинг очень тонко чувствовал перспективность того или иного научного направления, поэтому его работа над пакетом PHOENICS привлекла внимание многих специалистов. В результате 80-е годы прошлого столетия ознаменованы бурным развитием численных методов для решения уравнений математической физики и переосмыслением предложенных ранее алгоритмов. К наиболее продуктивным и интересным идеям того времени, оказавшим сильное влияние на современную вычислительную физику, можно отнести следующие.

1. Метод баланса (или метод конечного объема, или интегро-интерполяционный метод), предложенный А. А. Самарским в 1960 году [17]. Данный способ аппроксимации уравнений математической модели является одним из наиболее распространенных методов дискретизации и используется во многих пакетах прикладных программ.

2. Многосеточный метод [18], предложенный в работах Р. П. Федоренко и обобщенный в трудах Н. С. Бахвалова и Г. П. Астраханцева. В настоящее время данный способ численного решения краевых задач стал доминирующим, и трудно указать комплекс программ для моделирования широкого класса физико-химических процессов, который не использует многосеточные методы.

3. Итерационный метод Ванки (S. P. Vanka) для решения седловых задач и систем урав-

нений [19]. Оригинальный вариант метода Зейделя со специальным упорядочением неизвестных (сглаживатель Ванки) оказался настолько простым и эффективным алгоритмом, что послужил основой для целого семейства сглаживателей в многосеточных методах. В настоящее время сглаживатель Ванки часто используют для совместного численного решения систем дифференциальных уравнений в частных производных, описывающих совокупность одновременно протекающих физико-химических процессов (multiphysics simulation), и для решения седловых задач (saddle point problems).

Несмотря на значительный прогресс в области численных методов, программных и аппаратных средств вычислительной техники, на втором (переходном) периоде гидродинамики не было понято главного: математическое описание физико-химических процессов и решение основополагающих уравнений тесно взаимосвязаны между собой [20–22]. Поэтому использование более универсальных численных методов вместо аналитических позволит не только расширить классы моделируемых физико-химических процессов, но и снять ряд физических допущений, принятых при выводе уравнений (0.1).

Отказ от использования дифференциального исчисления для решения прикладных задач гидродинамики в пользу численных методов позволит отказаться от допущения бесконечной делимости континуума. Таким образом, третий (вычислительный) период гидродинамики основан на экспериментальном факте о существовании минимальных масштабов физико-химических процессов, рассматриваемых ранее в континуальном приближении. Целью данной работы является феноменологический вывод основополагающих уравнений, описывающих движение жидкости или газа при естественных ограничениях на минимальные пространственные и временные масштабы, анализ полученных результатов и сравнение их с традиционным подходом. Следует особо подчеркнуть, что единственной причиной ревизии основополагающих уравнений типа (0.1) является стремление более точно описать гидродинамические и тепловые макропроцессы при компьютерном моделировании.

§ 1. Закон сохранения массы

Противоречивость переходного периода гидродинамики обусловлена отсутствием взаимосвязи между уравнениями математической модели и методами их решения, точнее формальной заменой аналитических методов решения (начально-)краевых задач на численные. Считается, что гипотеза сплошности справедлива при $Kn < 10^{-3}$, в то время как уравнения Навье–Стокса в дифференциальной форме (0.1) соответствуют $Kn = +\infty$. Тем не менее, аналитический период гидродинамики связан с отысканием точных решений уравнений Навье–Стокса (0.1) [23]. Появление компьютеров только усугубило ситуацию. Метод конечного объема, как самый физически значимый способ аппроксимации (начально-)краевых задач, в общем случае представим в виде совокупности трех стадий: сначала записывают законы сохранения массы и импульса для конечного объема, затем стягивают этот конечный объем в точку и получают дифференциальные уравнения в частных производных типа (0.1). Далее полученные дифференциальные уравнения интегрируют по исходному конечному объему и получают разностную схему. При этом получается вовсе не то, с чего начинали: если первоначально плотность являлась характеристикой конечного объема, то при стягивании объема в точку плотность теряет физический смысл, но образует скалярное поле. То есть при интегрировании дифференциальных уравнений плотность различна в каждой точке конечного объема, хотя изначально была постоянной.

Выход из данной противоречивой ситуации очень простой: поскольку сложность современных задач не позволяет решать их точно, то следует отказаться от дифференциальных форм фундаментальных законов сохранения, то есть не стягивать конечные объемы в точку. Тогда минимальные размеры конечных объемов должны быть согласованы с дискретным строением материи в микромасштабах, то есть среду в минимальных объемах

можно считать сплошной ($Kn < 10^{-3}$). Однако отказ от дифференциальных уравнений для математического описания физико-химических процессов в макромасштабах заставляет пересмотреть современные представления о математическом моделировании.

Пусть некоторая замкнутая область Ω является областью течения жидкости или газа. Наша задача состоит в отыскании макроскопических величин (например, скорости, давления, температуры и других), описывающих состояние среды во времени и удовлетворяющих фундаментальным законам сохранения (массы, импульса, энергии и других). В вычислительной макромеханике область Ω разделяют на конечные объемы V_n , $n = 1, 2, \dots, N^v$, которые обладают следующими свойствами:

а) объединение всех N^v конечных объемов V_n есть исходная область Ω :

$$\bigcup_{n=1}^{N^v} V_n = \Omega;$$

б) соседние конечные объемы имеют общие поверхности (грани конечных объемов)

$$V_k \cap V_m = F_{km}.$$

Пример построения конечных объемов показан на рис. 1.

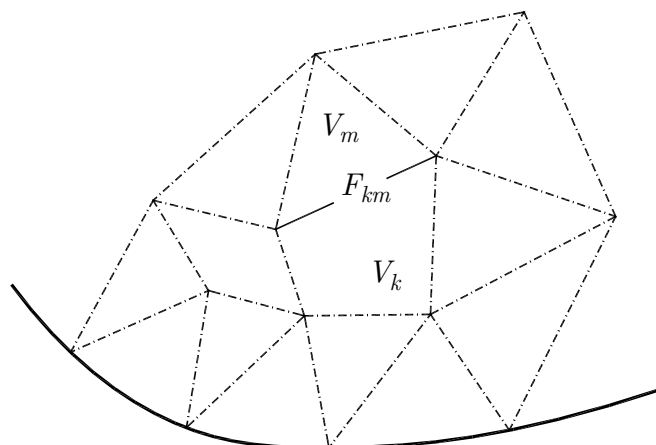


Рис. 1. Конечные объемы: F_{km} есть общая грань объемов V_k и V_m

Любая макроскопическая величина (масса, импульс, энергия и другие) в каждом конечном объеме может изменяться только за счет переноса количества этой величины через поверхность, ограничивающую данный конечный объем (грани), или некоторым образом порождаясь или уничтожаясь (источник или сток). Закон сохранения любой величины ϕ можно записать для каждого конечного объема V_n , $n = 1, 2, \dots, N^v$, следующим образом

$$\boxed{\text{Изменение } \phi \text{ в } V_n \text{ по времени } t} - \boxed{\text{Поток } \phi \text{ через грани внутрь } V_n} + \boxed{\text{Поток } \phi \text{ через грани из } V_n} = \boxed{\text{Сумма источников и стоков } \phi \text{ в } V_n}.$$

При этом поток любой величины ϕ из объема V_k в V_m через грань F_{km} должен быть равен потоку той же величины ϕ из объема V_m в V_k через ту же самую грань F_{km} (рис. 1). Тогда закон сохранения любой величины ϕ в области Ω будет следствием закона сохранения ϕ для каждого конечного объема V_n .

В вычислительной макромеханике моделирование физико-химических процессов осуществляют на основе законов сохранения для каждого конечного объема. При этом минимальный размер объемов ограничен условием, что молекулярным строением жидкости

или газа можно пренебречь. Полученные уравнения, которые выражают законы сохранения на всех конечных объемах, не будут содержать производные и очень удобны для компьютерных вычислений. Однако получить точное решение данных уравнений без компьютеров практически невозможно.

Основной целью ученых-механиков в аналитический период гидродинамики был вывод и точное решение основополагающих уравнений, описывающих течение жидкости и газа. Уравнения вычислительной макромеханики не подходили для решения их методами дифференциального и интегрального исчисления, поскольку не содержат производных. Поэтому пришлось уменьшить размеры конечных объемов до точки (стянуть объемы в точку): данный предельный переход противоречит физике, но приводит к дифференциальным уравнениям в частных производных, которые не зависят от конфигурации и формы конечных объемов.

Далее будут подробно представлены оба подхода к описанию физико-химических процессов как на основе вычислительной макромеханики, так и на основе классической гидродинамики. Результаты сравнительного анализа определяют выбор метода аппроксимации уравнений модели и ожидаемую точность вычислений.

Рассмотрим подробнее феноменологический вывод уравнения неразрывности (0.1a), выражающего фундаментальный закон сохранения массы (ФЗСМ), для сравнения различных подходов к математическому описанию движения жидкости или газа в макромасштабах. Выделим в потоке произвольный конечный объем (КО) V

$$V = \{(t, x, y, z) \mid 0 \leq t \leq h_t, 0 \leq x \leq h_x, 0 \leq y \leq h_y, 0 \leq z \leq h_z\}, \quad (1.1)$$

как показано на рис. 2. Здесь h_x , h_y , h_z и h_t есть характерные размеры КО V в пространстве и времени.

Баланс (фундаментальный закон сохранения) массы M на КО V имеет вид

$$M(t) = M(0) + Q_{x=0} + Q_{y=0} + Q_{z=0} - Q_{x=h_x} - Q_{y=h_y} - Q_{z=h_z} + S, \quad (1.2)$$

где $M(0)$ есть масса жидкости или газа в КО V в начальный момент времени $t = 0$, $M(t)$ есть масса жидкости или газа в КО V в момент времени t ($0 \leq t \leq h_t$), $Q_{x=0}$, $Q_{y=0}$ и $Q_{z=0}$ есть масса жидкости или газа, поступающего в КО V за время t ($0 \leq t \leq h_t$) через грани $F_{x=0}$, $F_{y=0}$ и $F_{z=0}$,

$$F_{x=0} = \{(0, y, z) \mid 0 \leq y \leq h_y, 0 \leq z \leq h_z\}, \quad (1.3a)$$

$$F_{y=0} = \{(x, 0, z) \mid 0 \leq x \leq h_x, 0 \leq z \leq h_z\}, \quad (1.3b)$$

$$F_{z=0} = \{(x, y, 0) \mid 0 \leq x \leq h_x, 0 \leq y \leq h_y\}, \quad (1.3c)$$

$Q_{x=h_x}$, $Q_{y=h_y}$ и $Q_{z=h_z}$ есть масса жидкости или газа, покидающего КО V за время t ($0 \leq t \leq h_t$) через грани $F_{x=h_x}$, $F_{y=h_y}$ и $F_{z=h_z}$,

$$F_{x=h_x} = \{(h_x, y, z) \mid 0 \leq y \leq h_y, 0 \leq z \leq h_z\}, \quad (1.3d)$$

$$F_{y=h_y} = \{(x, h_y, z) \mid 0 \leq x \leq h_x, 0 \leq z \leq h_z\}, \quad (1.3e)$$

$$F_{z=h_z} = \{(x, y, h_z) \mid 0 \leq x \leq h_x, 0 \leq y \leq h_y\}, \quad (1.3f)$$

S есть источниковый член. Далее будем полагать, что $S = 0$ и форма объема V остается неизменной.

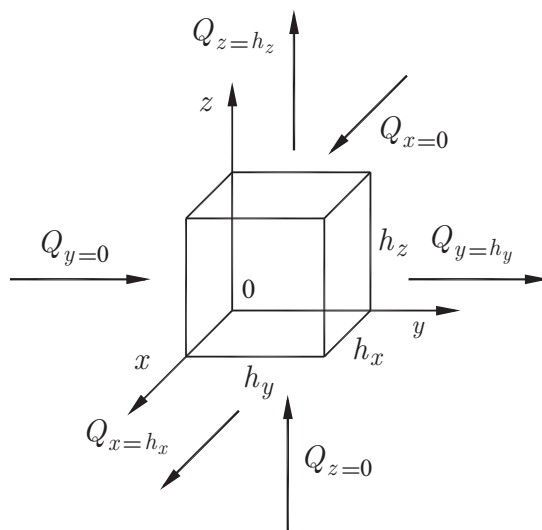


Рис. 2. Конечный объем в пространстве

Масса жидкости или газа, поступающего в КО V через грани (1.3) за время t составит:

$$Q_{x=0} = \int_0^t m_{x=0}(\xi) d\xi, \quad (1.4a)$$

$$Q_{y=0} = \int_0^t m_{y=0}(\xi) d\xi, \quad (1.4b)$$

$$Q_{z=0} = \int_0^t m_{z=0}(\xi) d\xi, \quad (1.4c)$$

$$Q_{x=h_x} = \int_0^t m_{x=h_x}(\xi) d\xi, \quad (1.4d)$$

$$Q_{y=h_y} = \int_0^t m_{y=h_y}(\xi) d\xi, \quad (1.4e)$$

$$Q_{z=h_z} = \int_0^t m_{z=h_z}(\xi) d\xi, \quad (1.4f)$$

где $m_{x=0}(t)$, $m_{y=0}(t)$, $m_{z=0}(t)$, $m_{x=h_x}(t)$, $m_{y=h_y}(t)$ и $m_{z=h_z}(t)$ есть массовые расходы через грани (1.3).

Подстановка (1.4) в (1.2) приводит к следующему уравнению

$$M(h_t) - M(0) = - \int_0^{h_t} (m_{x=h_x}(t) - m_{x=0}(t)) dt - \int_0^{h_t} (m_{y=h_y}(t) - m_{y=0}(t)) dt - \\ - \int_0^{h_t} (m_{z=h_z}(t) - m_{z=0}(t)) dt, \quad (1.5)$$

которое выражает ФЗСМ в КО V за время $t = h_t$. Разделим обе части (1.5) на $h_t V = h_t h_x h_y h_z$, тогда

$$\begin{aligned} \frac{1}{h_t} \left(\frac{M(h_t)}{V} - \frac{M(0)}{V} \right) + \frac{1}{h_t} \int_0^{h_t} \frac{m_{x=h_x}(t) - m_{x=0}(t)}{h_x h_y h_z} dt + \frac{1}{h_t} \int_0^{h_t} \frac{m_{y=h_y}(t) - m_{y=0}(t)}{h_x h_y h_z} dt + \\ + \frac{1}{h_t} \int_0^{h_t} \frac{m_{z=h_z}(t) - m_{z=0}(t)}{h_x h_y h_z} dt = 0. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Устремляя характерные размеры КО V к нулю ($\max(h_t, h_x, h_y, h_z) \rightarrow 0$), определим плотность сплошной среды (ρ) в КО объеме V как

$$\lim_{V \rightarrow 0} \frac{M(t)}{V} = \rho(t, x, y, z). \quad (1.7)$$

Теперь выражения для массовых расходов через грани (1.3) примут вид

$$m_{x=0}(t) = \int_0^{h_y} \int_0^{h_z} \rho(t, 0, y, z) u(t, 0, y, z) dz dy,$$

$$m_{x=h_x}(t) = \int_0^{h_y} \int_0^{h_z} \rho(t, h_x, y, z) u(t, h_x, y, z) dz dy,$$

$$m_{y=0}(t) = \int_0^{h_x} \int_0^{h_z} \rho(t, x, 0, z) u(t, x, 0, z) dz dx,$$

$$m_{y=h_y}(t) = \int_0^{h_x} \int_0^{h_z} \rho(t, x, h_y, z) u(t, x, h_y, z) dz dx,$$

$$m_{z=0}(t) = \int_0^{h_x} \int_0^{h_y} \rho(t, x, y, 0) u(t, x, y, 0) dy dx,$$

$$m_{z=h_z}(t) = \int_0^{h_x} \int_0^{h_y} \rho(t, x, y, h_z) u(t, x, y, h_z) dy dx.$$

При $\max(h_t, h_x, h_y, h_z) \rightarrow 0$ и учитывая, что

$$\begin{aligned} \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h} \int_0^h f(x) dx &= f(0), \\ \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(h) - f(0)}{h} &= f'(0), \end{aligned}$$

получим из (1.6) следующее дифференциальное выражение

$$\left. \frac{\partial \rho}{\partial t} \right|_{\substack{t=0 \\ x=0 \\ y=0 \\ z=0}} + \left. \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \right|_{\substack{t=0 \\ x=0 \\ y=0 \\ z=0}} + \left. \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \right|_{\substack{t=0 \\ x=0 \\ y=0 \\ z=0}} + \left. \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \right|_{\substack{t=0 \\ x=0 \\ y=0 \\ z=0}} = 0.$$

В силу произвольного выбора КО V данное соотношение будет справедливо для любой точки, то есть уравнение неразрывности принимает окончательный вид (0.1a)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0. \quad (1.8)$$

Дискретным аналогом (1.8) может служить либо явная схема

$$\frac{\hat{\rho}_{ijk}^{(n+1)} - \hat{\rho}_{ijk}^{(n)}}{h_t} + \left(\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \right)_{ijk}^{(n)} + \left(\frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \right)_{ijk}^{(n)} + \left(\frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \right)_{ijk}^{(n)} = 0, \quad (1.9)$$

либо неявная схема

$$\frac{\hat{\rho}_{ijk}^{(n+1)} - \hat{\rho}_{ijk}^{(n)}}{h_t} + \left(\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \right)_{ijk}^{(n+1)} + \left(\frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \right)_{ijk}^{(n+1)} + \left(\frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \right)_{ijk}^{(n+1)} = 0, \quad (1.10)$$

где $\hat{\rho}$ есть дискретный аналог плотности $\rho(t, x, y, z)$ в (1.8).

Наиболее спорным моментом в выводе уравнения неразрывности (1.8) является предельный переход (1.7): при стягивании объема V к нулю, масса M , заключенная в нем, также стремится к нулю, поэтому

$$V \rightarrow 0 \Rightarrow M(V) \rightarrow 0 \Rightarrow \rho = \lim_{V \rightarrow 0} \frac{M(V)}{V} = \left[\frac{0}{0} \right].$$

Поэтому в механике сплошных сред вводят понятие бесконечно малого объема, размеры которого пренебрежимо малы по сравнению со всем объемом системы, так что параметры среды в нем (плотность, скорость и пр.) можно считать постоянными, но он содержит в себе настолько много молекул, что эти параметры будут корректно определены [24]. Поэтому стягивание объема в точку при предельном переходе в (1.7) следует понимать, как стремление к бесконечно малому объему (в упомянутом выше смысле) [25]. Другими словами, если конечный объем стянуть в точку нельзя, но очень нужно, то значит можно. Точнее частные производные в (1.8) не совсем те, как определено в дифференциальном исчислении.

Аналогичная ситуация возникает и при определении производных от физических параметров сплошной среды по времени: вводится понятие «бесконечно малого промежутка времени», под которым подразумевается интервал времени, существенно меньший, чем характерное время рассматриваемого переходного процесса, но значительно больший, чем характерное время молекулярного движения.

Ранее уже упоминалось о данной парадоксальной ситуации: сначала записывают закон сохранения массы M в объеме V (1.6), причем плотность $\rho = M/V$ характеризует удельную массу объема V . Далее конечный объем V стягивают в точку, в пределе $V \rightarrow 0$ получая дифференциальное уравнение (1.8). При этом плотность ρ уже образует скалярное поле. Аппроксимация уравнения неразрывности (1.8) методом конечного объема приводит к дискретному аналогу исходного закона сохранения массы (1.6), в котором дискретный аналог плотности ρ определен в отдельных точках, а является не характеристикой объема V , как было изначально до стягивания КО в точку.

Поскольку современные задачи гидродинамики исключают возможность использования дифференциального исчисления, то следует отказаться от нефизичного стягивания конечных объемов в точку и, как следствие, от дифференциальных уравнений типа (1.8). Для этого воспользуемся понятиями средней длины свободного пробега молекулы жидкости или газа l_{mol} и среднем временем между столкновениями молекул t_{mol} . Будем полагать, что шаги сетки и минимальный пространственный масштаб \bar{h}_s удовлетворяет ограничению

$$\min(h_x, h_y, h_z) \geq \bar{h}_s \gg l_{mol}. \quad (1.11)$$

Напомним, что уравнения Навье–Стокса считаются справедливыми при $\text{Kn} \leq 10^{-3}$, где число Кнудсена Kn определено как

$$\text{Kn} = \frac{l_{mol}}{\bar{h}_s}.$$

Стягивание конечного объема V в точку соответствует: $\min(h_x, h_y, h_z) \rightarrow 0 \Rightarrow \text{Kn} \rightarrow +\infty$. Аналогично, величина шага по времени ограничена соотношением

$$h_t \geq \bar{h}_t \gg t_{mol}, \quad (1.12)$$

где \bar{h}_t есть минимальный временной масштаб.

К сожалению, нет четкой границы между переходным ($10^{-3} < \text{Kn} < 1$) и континуальным ($\text{Kn} \leq 10^{-3}$) режимами течения. Тем не менее, всегда будем полагать, что для описания любых физико-химических процессов в континуальном приближении существует минимальный пространственный и временной масштабы \bar{h}_s и \bar{h}_t , величины которых зависят от решаемой задачи.

§ 2. Фундаментальный закон сохранения массы при естественных ограничениях на минимальные пространственный и временной масштабы

Итак, фундаментальный закон сохранения массы (ФЗСМ) имеет вид (1.6), причем шаги сетки h_x, h_y, h_z и h_t , а также минимальный пространственный и временной масштабы \bar{h}_s^m и \bar{h}_t^m удовлетворяют ограничениям (1.11) и (1.12) соответственно. Недостающие связи между отдельными функциями всегда восполняют на основе феноменологических законов. Игнорируя молекулярное строение вещества, феноменологический метод исследования наделяет континуум физическими свойствами реальной жидкости или газа для наилучшего соответствия между наблюдаемыми явлениями и их математическим описанием.

Для аппроксимации ФЗСМ (1.6) воспользуемся простейшей равномерной сеткой, которая состоит из двух множеств точек x_i^v и x_i^f ,

$$\begin{aligned} x_i^v &= \frac{i-1}{n_x}, & i &= 1, 2, \dots, n_x + 1, \\ x_i^f &= \frac{1}{2}(x_i^v + x_{i+1}^v), & i &= 1, 2, \dots, n_x, \end{aligned}$$

здесь n_x есть параметр дискретизации, причем

$$x_{i+1}^v - x_i^v = x_i^v - x_{i-1}^v = h_x = \text{const},$$

где $h_x = 1/n_x$ есть шаг сетки. Аналогично построим одномерные сетки по остальным пространственным направлениям и времени. КО V (1.1) на данной сетке имеет вид

$$\mathcal{V}_{ijk}^{(n)} = \{(t, x, y, z) \mid t_n^v \leq t < t_{n+1}^v, x_i^v \leq x < x_{i+1}^v, y_j^v \leq y < y_{j+1}^v, z_k^v \leq z < z_{k+1}^v\}, \quad (2.1)$$

где $h_t = t_{n+1}^v - t_n^v$ есть шаг по времени, а гранями объема $\mathcal{V}_{ijk}^{(n)}$ являются:

$$F_{x=x_i^v} = \{(x_i^v, y, z) \mid y_j^v \leq y \leq y_{j+1}^v, z_k^v \leq z \leq z_{k+1}^v\}, \quad (2.2a)$$

$$F_{y=y_j^v} = \{(x, y_j^v, z) \mid x_i^v \leq x \leq x_{i+1}^v, z_k^v \leq z \leq z_{k+1}^v\}, \quad (2.2b)$$

$$F_{z=z_k^v} = \{(x, y, z_k^v) \mid x_i^v \leq x \leq x_{i+1}^v, y_j^v \leq y \leq y_{j+1}^v\}, \quad (2.2c)$$

$$F_{x=x_{i+1}^v} = \{(x_{i+1}^v, y, z) \mid y_j^v \leq y \leq y_{j+1}^v, z_k^v \leq z \leq z_{k+1}^v\}, \quad (2.2d)$$

$$F_{y=y_{j+1}^v} = \{(x, y_{j+1}^v, z) \mid x_i^v \leq x \leq x_{i+1}^v, z_k^v \leq z \leq z_{k+1}^v\}, \quad (2.2e)$$

$$F_{z=z_{k+1}^v} = \{(x, y, z_{k+1}^v) \mid x_i^v \leq x \leq x_{i+1}^v, y_j^v \leq y \leq y_{j+1}^v\}. \quad (2.2f)$$

Самое трудное определить на построенной сетке плотность $\rho_{ijk}^{(n)}$, которая характеризует удельную массу объема $\mathcal{V}_{ijk}^{(n)}$ (2.1), то есть $\rho_{ijk}^{(n)} : M(\mathcal{V}_{ijk}^{(n)})/\mathcal{V}_{ijk}^{(n)} \rightarrow \mathbb{R}^+$, а для вычислений удобнее задавать плотность не на объеме, а в точке. Поэтому положим, что плотность является постоянной внутри объема $\mathcal{V}_{ijk}^{(n)}$, но определена в центре объема, то есть в точке $(t_n^v, x_i^f, y_j^f, z_k^f)$:

$$\rho_{ijk}^{(n)} = \{\rho(t, x, y, z) = \text{Const}^\rho \mid t_{n-1}^f \leq t < t_n^f, x_i^v \leq x < x_{i+1}^v, y_j^v \leq y < y_{j+1}^v, z_k^v \leq z < z_{k+1}^v\}, \quad (2.3)$$

где Const^ρ есть некоторая константа.

Таким образом, плотность $\rho_{ijk}^{(n)}$ является кусочно-постоянной функцией, то есть постоянной внутри объема $\mathcal{V}_{ijk}^{(n)}$ и разрывной на его гранях (2.2). Следствием выполнения условий (1.11) и (1.12) является «растровый» характер решения: область разбивается на конечное количество взаимонепересекающихся конечных объемов, в каждом из которых решение постоянно (среднее по объему). Точно так формируется растровое изображение на отображающих устройствах из отдельных пикселей. Чтобы увеличить качество растрового изображения, необходимо увеличивать количество пикселей; чтобы увеличить разрешение деталей моделируемых процессов, необходимо увеличивать количество объемов (сгущать сетку) при соблюдении ограничений (1.11) и (1.12).

Поскольку плотность жидкости или газа (2.3) зависит от температуры T и давления p , отсюда следует, что температура и давление также являются кусочно-постоянными функциями: постоянными внутри объема $\mathcal{V}_{ijk}^{(n)}$ и разрывными на его гранях (2.2):

$$T_{ijk}^{(n)} = \{T(t, x, y, z) = \text{Const}^T \mid t_{n-1}^f \leq t < t_n^f, x_i^v \leq x < x_{i+1}^v, y_j^v \leq y < y_{j+1}^v, z_k^v \leq z < z_{k+1}^v\}, \quad (2.4)$$

$$p_{ijk}^{(n)} = \{p(t, x, y, z) = \text{Const}^p \mid t_{n-1}^f \leq t < t_n^f, x_i^v \leq x < x_{i+1}^v, y_j^v \leq y < y_{j+1}^v, z_k^v \leq z < z_{k+1}^v\}. \quad (2.5)$$

Компоненты скорости лучше задавать на гранях (2.2) объема $\mathcal{V}_{ijk}^{(n)}$. Тогда конечные объемы \bar{U} , \bar{V} и \bar{W} для аппроксимации уравнений движения по X , Y и Z на данной сетке

ИМЕЮТ ВИД

$$\begin{aligned}\bar{U}_{ijk}^{(n)} &= \{(t, x, y, z) \mid t_{n-1}^f \leq t < t_n^f, x_{i-1}^f \leq x < x_i^f, \\ &\quad y_j^v \leq y < y_{j+1}^v, z_k^v \leq z < z_{k+1}^v\}, \\ \bar{V}_{ijk}^{(n)} &= \{(t, x, y, z) \mid t_{n-1}^f \leq t < t_n^f, x_i^v \leq x < x_{i+1}^v, \\ &\quad y_{j-1}^f \leq y < y_j^f, z_k^v \leq z < z_{k+1}^v\}, \\ \bar{W}_{ijk}^{(n)} &= \{(t, x, y, z) \mid t_{n-1}^f \leq t < t_n^f, x_i^v \leq x < x_{i+1}^v, \\ &\quad y_j^v \leq y < y_{j+1}^v, z_{k-1}^f \leq z < z_k^f\}.\end{aligned}$$

Таким образом, компоненты скорости $u_{ijk}^{(n)}$, $v_{ijk}^{(n)}$ и $w_{ijk}^{(n)}$ также являются кусочно-постоянными функциями: постоянными внутри объемов $\bar{U}_{ijk}^{(n)}$, $\bar{V}_{ijk}^{(n)}$ и $\bar{W}_{ijk}^{(n)}$, и разрывными на их гранях. Все консервативные функции ($p_{ijk}^{(n)}$, $T_{ijk}^{(n)}$, $\vec{V}_{ijk}^{(n)}$ и др.) являются разрывными, а потоковые функции — непрерывными. Напомним, что сетки со смещенным расположением КО называют разнесенными и они получили широкое распространение в вычислительной гидродинамике [15, 16]. Пример 2D разнесенной сетки показан на рис. 3.

Наличие разрывов консервативных функций $p_{ijk}^{(n)}$, $T_{ijk}^{(n)}$, $u_{ijk}^{(n)}$ и др. при соблюдении условий (1.11) и (1.12) является характерным отличием рассматриваемой модели жидкости и газа от классического континуума.

Определение 1. Абстрактную материальную среду при характерных масштабах (1.11) и (1.12) будем называть *дисконтинуум*. Макроскопические параметры (плотность $\rho_{ijk}^{(n)}$, скорость $\vec{V}_{ijk}^{(n)}$, давление $p_{ijk}^{(n)}$, температура $T_{ijk}^{(n)}$ и др.) для дисконтинуума являются функциями конечных объемов: определены постоянными внутри данных объемов и разрывны на гранях. Таким образом, модель дисконтинуума подразумевает, что все параметры, характеризующие термодинамическое состояние движущейся среды, дискретно изменяются по всему объему, занятому средой.

ФЗСМ (1.6) на построенной сетке принимает вид

$$\begin{aligned}& \frac{1}{h_t} \left(\frac{M(\mathcal{V}_{ijk}^{(n+1)})}{V} - \frac{M(\mathcal{V}_{ijk}^{(n)})}{V} \right) + \\ & + \frac{1}{h_t} \int_{t_n^v}^{t_{n+1}^v} \frac{1}{h_y h_z} \int_{y_j^v}^{y_{j+1}^v} \int_{z_k^v}^{z_{k+1}^v} \frac{\rho(t, x_{i+1}^v, y, z) u(t, x_{i+1}^v, y, z) - \rho(t, x_i^v, y, z) u(t, x_i^v, y, z)}{h_x} dz dy dt + \\ & + \frac{1}{h_t} \int_{t_n^v}^{t_{n+1}^v} \frac{1}{h_x h_z} \int_{x_i^v}^{x_{i+1}^v} \int_{z_k^v}^{z_{k+1}^v} \frac{\rho(t, x, y_{j+1}^v, z) v(t, x, y_{j+1}^v, z) - \rho(t, x, y_j^v, z) v(t, x, y_j^v, z)}{h_y} dz dx dt + \\ & + \frac{1}{h_t} \int_{t_n^v}^{t_{n+1}^v} \frac{1}{h_x h_y} \int_{x_i^v}^{x_{i+1}^v} \int_{y_j^v}^{y_{j+1}^v} \frac{\rho(t, x, y, z_{k+1}^v) w(t, x, y, z_{k+1}^v) - \rho(t, x, y, z_k^v) w(t, x, y, z_k^v)}{h_z} dy dx dt = 0,\end{aligned}\tag{2.6}$$

где $h_t = t_{n+1}^v - t_n^v$, $h_x = x_{i+1}^v - x_i^v$, $h_y = y_{j+1}^v - y_j^v$, $h_z = z_{k+1}^v - z_k^v$ есть шаги сетки, $V = h_x h_y h_z$.

Поскольку плотность среды в КО составит

$$\frac{M(\mathcal{V}_{ijk}^{(n)})}{V} = \rho_{ijk}^{(n)},$$

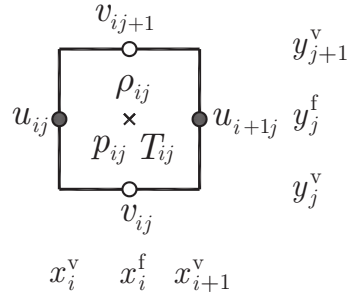


Рис. 3. 2D разнесенная сетка

точно вычисляя интегралы от кусочно-постоянных функций, получим

$$\begin{aligned}
 0 &= \frac{\rho_{ijk}^{(n+1)} - \rho_{ijk}^{(n)}}{h_t} + \\
 &+ \frac{1}{h_t} \int_{t_n^v}^{t_{n+1}^v} \frac{\rho(t, x_{i+1}^v, y_j^f, z_k^f) u(t, x_{i+1}^v, y_j^f, z_k^f) - \rho(t, x_i^v, y_j^f, z_k^f) u(t, x_i^v, y_j^f, z_k^f)}{h_x} dt + \\
 &+ \frac{1}{h_t} \int_{t_n^v}^{t_{n+1}^v} \frac{\rho(t, x_i^f, y_{j+1}^v, z_k^f) v(t, x_i^f, y_{j+1}^v, z_k^f) - \rho(t, x_i^f, y_j^v, z_k^f) v(t, x_i^f, y_j^v, z_k^f)}{h_y} dt + \\
 &+ \frac{1}{h_t} \int_{t_n^v}^{t_{n+1}^v} \frac{\rho(t, x_i^f, y_j^f, z_{k+1}^v) w(t, x_i^f, y_j^f, z_{k+1}^v) - \rho(t, x_i^f, y_j^f, z_k^v) w(t, x_i^f, y_j^f, z_k^v)}{h_z} dt.
 \end{aligned}$$

Последний интеграл по времени также вычисляют точно, используя свойство аддитивности определённого интеграла относительно подобластей

$$\begin{aligned}
 &\frac{1}{h_t} \int_{t_n^v}^{t_{n+1}^v} \frac{\rho(t, x_i^f, y_j^f, z_{k+1}^v) w(t, x_i^f, y_j^f, z_{k+1}^v) - \rho(t, x_i^f, y_j^f, z_k^v) w(t, x_i^f, y_j^f, z_k^v)}{h_z} dt = \\
 &= \frac{1}{h_t} \int_{t_n^v}^{t_n^f} \frac{\rho(t, x_i^f, y_j^f, z_{k+1}^v) w(t, x_i^f, y_j^f, z_{k+1}^v) - \rho(t, x_i^f, y_j^f, z_k^v) w(t, x_i^f, y_j^f, z_k^v)}{h_z} dt + \\
 &+ \frac{1}{h_t} \int_{t_n^f}^{t_{n+1}^v} \frac{\rho(t, x_i^f, y_j^f, z_{k+1}^v) w(t, x_i^f, y_j^f, z_{k+1}^v) - \rho(t, x_i^f, y_j^f, z_k^v) w(t, x_i^f, y_j^f, z_k^v)}{h_z} dt = \\
 &= \frac{1}{2} \frac{\rho_{ijk+1}^{(n)} w_{ijk+1}^{(n)} - \rho_{ijk}^{(n)} w_{ijk}^{(n)}}{h_z} + \frac{1}{2} \frac{\rho_{ijk+1}^{(n+1)} w_{ijk+1}^{(n+1)} - \rho_{ijk}^{(n+1)} w_{ijk}^{(n+1)}}{h_z}.
 \end{aligned}$$

Остальные интегралы, выражающие массоперенос на временных уровнях n и $n + 1$, вычисляют точно аналогичным образом.

Таким образом, ФЗСМ на КО (2.1) принимает вид сходный со схемой Кранка–Николсон

$$\begin{aligned} \frac{\rho_{ijk}^{(n+1)} - \rho_{ijk}^{(n)}}{h_t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\rho_{i+1jk}^{(n)} u_{i+1jk}^{(n)} - \rho_{ijk}^{(n)} u_{ijk}^{(n)}}{h_x} + \frac{\rho_{i+1jk}^{(n+1)} u_{i+1jk}^{(n+1)} - \rho_{ijk}^{(n+1)} u_{ijk}^{(n+1)}}{h_x} + \right. \\ \left. + \frac{\rho_{ij+1k}^{(n)} v_{ij+1k}^{(n)} - \rho_{ijk}^{(n)} v_{ijk}^{(n)}}{h_y} + \frac{\rho_{ij+1k}^{(n+1)} v_{ij+1k}^{(n+1)} - \rho_{ijk}^{(n+1)} v_{ijk}^{(n+1)}}{h_y} + \right. \\ \left. + \frac{\rho_{ijk+1}^{(n)} w_{ijk+1}^{(n)} - \rho_{ijk}^{(n)} w_{ijk}^{(n)}}{h_z} + \frac{\rho_{ijk+1}^{(n+1)} w_{ijk+1}^{(n+1)} - \rho_{ijk}^{(n+1)} w_{ijk}^{(n+1)}}{h_z} \right) = 0. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Определение 2. Поскольку все интегралы от кусочно-постоянных функций в (2.6) вычислены точно, то ФЗСМ (2.7) является *точным* при $h_x = h_y = h_z = \tilde{h}_s \gg l_{mol}$ (1.11) и $h_t = \tilde{h}_t \gg t_{mol}$ (1.12), и *приближённым* при $\min(h_x, h_y, h_z) > \tilde{h}_s \gg l_{mol}$ и $h_t > \tilde{h}_t \gg t_{mol}$.

Данное уравнение (2.7) уже нельзя назвать уравнением неразрывности, поскольку все входящие в него консервативные переменные ρ , u , v и w являются разрывными на границах КО, а потоковые переменные ρu , ρv и ρw — непрерывными. Обратим внимание, что ФЗСМ (2.7) сходен со схемой Кранка–Николсон и указывает на нефизичность явных и неявных схем (1.9) и (1.10). В самом деле, выражение $(\rho u)'_x + (\rho v)'_y + (\rho w)'_z$ в уравнении неразрывности (1.8) описывает массоперенос, который происходит на каждом временном слое, а не только на предыдущем (как в явных схемах) или последующих (как в неявных схемах) слоях.

Взаимосвязь между точной (2.7) и приближёнными задачами из определения 2 показана на рис. 4. Для точной задачи возможно построить приближённую задачу двумя способами.

1. Увеличивая шаг сетки в (2.7) ($\min(h_x, h_y, h_z) > \tilde{h}_s \gg l_{mol}$ и $h_t > \tilde{h}_t \gg t_{mol}$); различие между точной и приближённой задачами состоит лишь в величине шага сетки.

2. Устремляя шаг сетки к нулю в (2.7) ($\max(h_x, h_y, h_z) \rightarrow 0$), в пределе получим приближённую (дифференциальную) задачу (1.8). Данный предельный переход возможен лишь в континуальном приближении, то есть при игнорировании молекулярного строения среды. Далее приближённой (дифференциальной) задаче (1.8) сопоставляют приближённую сеточную задачу (1.9) или (1.10), или какую-либо другую.

В настоящее время интенсивно развивают схемы высокого порядка аппроксимации для уравнений Навье–Стокса (0.1) и других уравнений, имеющих важное прикладное значение. Однако из рис. 4 следует бессмысленность данного направления с физической точки зрения: более точное численное приближение типа (1.9) или (1.10) к приближённой задаче (1.8) не позволит получить более точное приближение к точной задаче из определения 2.

Дискретные уравнения типа (1.9) или (1.10) получены в соответствии с методологией вычислительной гидродинамики (CFD), в то время как уравнения типа (2.7) получены в соответствии с методологией *Вычислительной МакроМеханики* (ВММ), где термин «вычислительный» подразумевает решение основополагающих уравнений только при помощи вычислительной техники, а термин «макро» означает естественные ограничения на минимальные пространственный и временной масштабы $\tilde{h}_s \gg l_{mol}$ и $\tilde{h}_t \gg t_{mol}$. Основу ВММ составляют фундаментальные законы сохранения физических величин, физические ограничения на минимальные пространственный и временной масштабы и феноменологические законы, восполняющие микромасштабные связи между отдельными функциями.

Покажем различия между континуальным и дисконтинуальным приближениями на примере простейшей дифференциальной задачи

$$u'' = f(x),$$

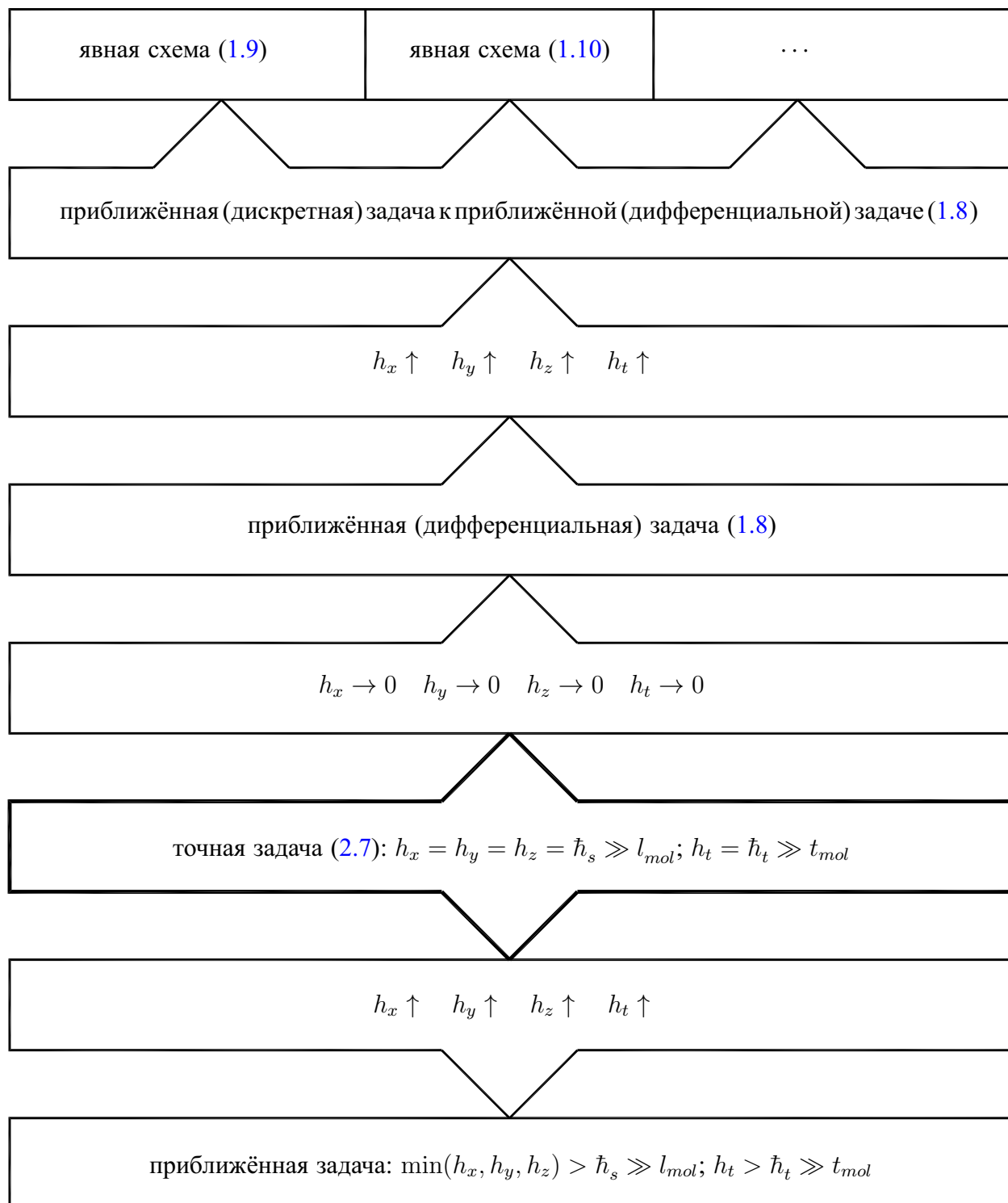


Рис. 4. Точная и приближённые задачи в (дис)континуальном приближениях

и ее дискретного аналога

$$\frac{u(x_i^f) - u(x_{i-1}^f)}{h} = f(x_i^y).$$

Разница между дифференциальной задачей и ее дискретным аналогом на отрезке $[x_{i-1}^f, x_i^f]$

составит

$$\mathcal{E} = \max_{[x_{i-1}^f, x_i^f]} \left| u''(x_i^y) - \frac{u(x_i^f) - u(x_{i-1}^f)}{h} \right|.$$

В континуальном приближении дифференциальная задача считается точной, а дискретная задача — приближённой. Полагая, что $u(x)$ является бесконечно дифференцируемой функцией, и используя разложение в ряд Тейлора нетрудно получить для достаточно малых шагов сетки h

$$\mathcal{E} \approx \frac{h^2}{24} \max_{[x_{i-1}^f, x_i^f]} |u'''(x_i^y)|.$$

Очевидно, что $\mathcal{E} \rightarrow 0$ при $h \rightarrow 0$, что означает сходимость разностной схемы.

В дисконтинуальном приближении дискретная задача считается точной, а дифференциальная задача — приближённой. В этом случае оценка погрешности имеет вид

$$\frac{\tilde{h}_s^2}{24} \min_{[x_{i-1}^f, x_i^f]} |u'''(x_i^y)| \leq \mathcal{E} \leq \frac{h^2}{24} \max_{[x_{i-1}^f, x_i^f]} |u'''(x_i^y)|,$$

где \tilde{h}_s есть минимальный пространственный масштаб (1.11). В силу физического ограничения $\tilde{h}_s > 0$ решения дискретной и дифференциальной задач в общем случае различны. Другими словами, даже точное решение уравнений Навье–Стокса (0.1) является приближённым в вычислительной макромеханике.

§ 3. Уравнение теплопроводности

Покажем различия между континуальным и дисконтинуальными подходами на примере краевой задачи для уравнения теплопроводности

$$(\lambda(x)u'_x)' + f(x) = 0, \quad u(0) = u(1) = 0, \quad (3.1)$$

где u есть температура, f — источниковый член, а λ — гладкий или разрывный коэффициент теплопроводности.

Запишем данное уравнение в виде

$$q'_x + f(x) = 0, \quad q(x) = \lambda(x)u'_x$$

для последующей аппроксимации методом конечного объема на равномерной сетке [26]. Здесь q есть удельная плотность теплового потока. Интегрирование данного уравнения по конечному объёму $[x_{i-1}^f, x_i^f]$ (то есть точки x_i^y являются узлами сетки) приводит к следующему соотношению

$$q(x_i^f) - q(x_{i-1}^f) + \int_{x_{i-1}^f}^{x_i^f} f(x) dx = 0. \quad (3.2)$$

Далее, следуя А. А. Самарскому [26], преобразуем

$$u'_x = \frac{q(x)}{\lambda(x)} \Rightarrow \int_{x_{i-1}^y}^{x_i^y} u'_x dx = \int_{x_{i-1}^y}^{x_i^y} \frac{q(x)}{\lambda(x)} dx \Rightarrow u_i^h - u_{i-1}^h = q(x_{i-1}^f) \int_{x_{i-1}^y}^{x_i^y} \frac{dx}{\lambda(x)}.$$

Будем полагать, что коэффициент теплопроводности является постоянным

$$\lambda(x) = \lambda(x_{i-1}^y), \quad x \in [x_{i-1}^y, x_{i-1}^f].$$

Тогда

$$\frac{1}{\langle \lambda \rangle_i^-} = \int_{x_{i-1}^y}^{x_i^y} \frac{dx}{\lambda(x)} = \int_{x_{i-1}^y}^{x_{i-1}^f} \frac{dx}{\lambda(x)} + \int_{x_{i-1}^f}^{x_i^y} \frac{dx}{\lambda(x)} = \frac{h_x}{2} \frac{1}{\lambda(x_{i-1}^y)} + \frac{h_x}{2} \frac{1}{\lambda(x_i^y)} = h_x \frac{\lambda(x_{i-1}^y) + \lambda(x_i^y)}{2\lambda(x_{i-1}^y)\lambda(x_i^y)}.$$

Отсюда нетрудно получить

$$q(x_{i-1}^f) = \langle \lambda \rangle_i^- \frac{u_i^h - u_{i-1}^h}{h_x}, \quad \langle \lambda \rangle_i^- = 2 \frac{\lambda(x_{i-1}^y)\lambda(x_i^y)}{\lambda(x_{i-1}^y) + \lambda(x_i^y)}, \quad (3.3a)$$

и для другой грани КО

$$q(x_i^f) = \langle \lambda \rangle_i^+ \frac{u_{i+1}^h - u_i^h}{h_x}, \quad \langle \lambda \rangle_i^+ = 2 \frac{\lambda(x_i^y)\lambda(x_{i+1}^y)}{\lambda(x_i^y) + \lambda(x_{i+1}^y)}. \quad (3.3b)$$

Тогда дискретный аналог уравнения теплопроводности (3.1) принимает вид

$$\langle \lambda \rangle_i^+ \frac{u_{i+1}^h - u_i^h}{h_x} - \langle \lambda \rangle_i^- \frac{u_i^h - u_{i-1}^h}{h_x} + \int_{x_{i-1}^f}^{x_i^f} f(x) dx = 0. \quad (3.4)$$

Обратим внимание, что уравнение теплопроводности (3.1) является уравнением второго порядка: один порядок возникает из-за стягивания КО в точку, а второй порядок возникает из-за феноменологических гипотез градиентного типа (закон Фурье, закон Фика, закон трения Ньютона и т. д.).

Уравнение теплопроводности в вычислительной макромеханике выражает закон сохранения энергии: тепловой поток из конечного объема равен тепловому потоку в конечный объем плюс объемное тепловыделение в конечном объеме (3.2):

$$q(x_i^f) = q(x_{i-1}^f) - \int_{x_{i-1}^f}^{x_i^f} f(x) dx. \quad (3.5)$$

Первое принципиальное различие между традиционной механикой сплошных сред и ВММ состоит в форме записи феноменологических законов. Жан-Батист Жозеф Фурье экспериментально установил, что при переносе теплоты теплопроводностью плотность потока теплоты через некоторый контур пропорционален градиенту температуры, созданному по разные стороны от этого контура, то есть

$$q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial \vec{n}}, \quad (3.6)$$

где T есть абсолютная температура, К; \vec{n} — единичный вектор нормали к изотермической поверхности; λ есть коэффициент теплопроводности, Вт/(м·К). Знак «−» указывает, что теплота переносится в сторону уменьшения температуры. Данное уравнение, называемое

феноменологическим законом теплопроводности Фурье, содержит производную от температуры. Поскольку в ВММ не используют производные для описания законов сохранения из-за естественных ограничений на минимальные пространственный и временной масштабы, то закон теплопроводности Фурье будет использован не в виде (3.6), а в виде (3.3). Другими словами, подстановка (3.3) в (3.5) приводит к известному уравнению (3.4), то есть формально совпадает с дискретным аналогом уравнения теплопроводности (3.1).

Второе принципиальное различие состоит в виде получаемого решения. Численное решение задач традиционной механикой сплошных сред подразумевает, что приближение к решению дифференциальной задачи отыскивают в отдельных точках и интерполируют на всю область. Способ интерполяции зависит от решаемой задачи — интерполяция численного решения задачи (3.1) определяется гладкостью коэффициента теплопроводности λ : при достаточно гладком λ решение $u(x)$ будет дважды дифференцируемым, поэтому следует ожидать хороших результатов от применения сплайн-интерполяции. С другой стороны, если коэффициент λ разрывен, то сплайн-интерполяция через линии или поверхности разрыва коэффициента теплопроводности будет не точна. В ВММ решения отыскивают во всей области без какой-либо интерполяции.

В качестве примера рассмотрим краевую задачу

$$\frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h_x^2} + 4\pi^2\omega^2 \sin(2\pi\omega x_i^v) = 0, \quad u(0) = u(1) = 0, \quad (3.7)$$

где $\omega = 1, 2, 3, \dots$ есть целочисленный параметр, и приближённую задачу

$$u''(x) + 4\pi^2\omega^2 \sin(2\pi\omega x) = 0, \quad u(0) = u(1) = 0, \quad (3.8)$$

которая имеет аналитическое решение

$$u(x) = \sin(2\pi\omega x). \quad (3.9)$$

Построим равномерные вычислительные сетки с 3^{L+1} , $L = 1, 2, 3, 4, 5$, конечными объемами или с $N = 3^{L+1} + 1$ узлами, шаг сетки составит $h_x = 1/3^{L+1}$. Вычислительный эксперимент состоял в решении краевой задачи (3.7) методом прогонки и сравнении с аналитическим решением (3.9) приближённой задачи (3.8).

Сначала сравним численные решения задачи (3.7) с аналитическим решением (3.9) при $L = 1 \Rightarrow N = 10$. В континуальном приближении численное решение задачи (3.7) отыскивают прогонкой в N точках, далее полученные результаты интерполируют сплайнами на всю область $(0, 1)$, как показано на рис. 5 (слева). В дисконтинуальном приближении численное решение задачи (3.7) определено сразу на всей области $[0, 1]$, как показано на рис. 5 (справа). Отрезком “—” показано среднее значение решения на конечном объеме $[x_{i-1}^f, x_i^f]$, а символом • — значение функции u в узле сетки, то есть

$$u_i = u(x_i^v), \quad x_i^v \in [x_{i-1}^f, x_i^f].$$

Результаты вычислений с $N = 10, 28, 82, 730$ в дисконтинуальном приближении приведены на рис. 6. В [26] показано, что функция u_i — решение модельной задачи (3.7) — будет стремиться к аналитическому решению (3.9) приближённой задачи (3.8) при $h_x \rightarrow 0$. В данном подходе шаг сетки h_x может быть уменьшен лишь до некоторого минимального значения \tilde{h}_s^m , причем задача (3.7) с $h_x = \tilde{h}_s^m$ считается точной. Сохранение физических величин во всей области (консерватизм) является алгебраическим следствием сохранения в каждом объеме.

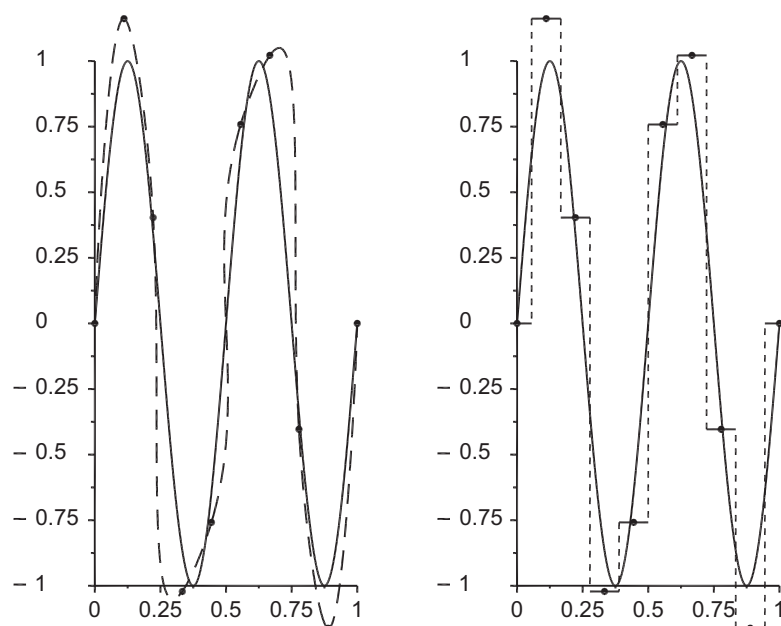


Рис. 5. Результаты вычислительного эксперимента ($L = 1 \Rightarrow N = 10$): слева численное решение (\bullet) в непрерывном приближении (пунктиром показана сплайн-интерполяция), справа численное решение (\bullet) в дисконтинуальном приближении (пунктиром показаны разрывы решения на гранях конечных объемов), сплошная линия (3.9)

Важнейшим проблемно-зависимым компонентом любого итерационного алгоритма является выбор критерия останова итераций. Недостаточное количество выполненных итераций приводит к потере точности численного решения, а излишнее количество — к неоправданному росту вычислительной работы. В дисконтинуальном приближении решение отыскивают во всей области вне зависимости от шага сетки, но точность решения определяется именно шагом сетки. Поэтому сравнение численных решений на сетках с разными шагами позволит адаптивно задать критерий останова итерационного процесса.

Предположим, что построена некоторая мелкая сетка. Построим последовательность грубых сеток посредством утроения шага, что эквивалентно агломерации КО: к выделенному КО присоединяют соседние. Тогда критерий останова можно определить в виде

$$\Phi = \max_{u_i^{L+1} \neq 0} \frac{|u_i^L - u_i^{L+1}|}{|u_i^{L+1}|} < \varepsilon,$$

где u_i^L есть решение, полученное на более грубой сетке, а u_i^{L+1} — на более мелкой, ε — малый параметр, зависящий от задачи, L — номер сеточного уровня. На рис. 6 показано сравнение аналитического решения приближённой задачи (3.9) и численного решения краевой задачи (3.7) при $L = 1 \Rightarrow N = 10$. Очевидно, что точность численного решения невелика.

На рис. 6 так же показано численное решение краевой задачи (3.7) на сетке с втрое меньшим шагом: $L = 2 \Rightarrow N = 28$. Пунктирной линией показан узел, в котором функция $|u_i^L - u_i^{L+1}|/|u_i^{L+1}|$ достигает максимума. Аналогичные результаты приведены для $L = 3 \Rightarrow N = 82$.

Зависимость функции Φ от количества узлов N показывает, что при $L = 5 \Rightarrow N = 730$ величина Φ достигает значения $\approx 10^{-4}$ что достаточно для большинства приложений. По мере стремления к минимальному шагу ($h_x \rightarrow \bar{h}_s$) величина Φ будет стремиться к нулю, поскольку точная и приближённая задачи совпадают при $h_x = \bar{h}_s$. В данном случае исследо-

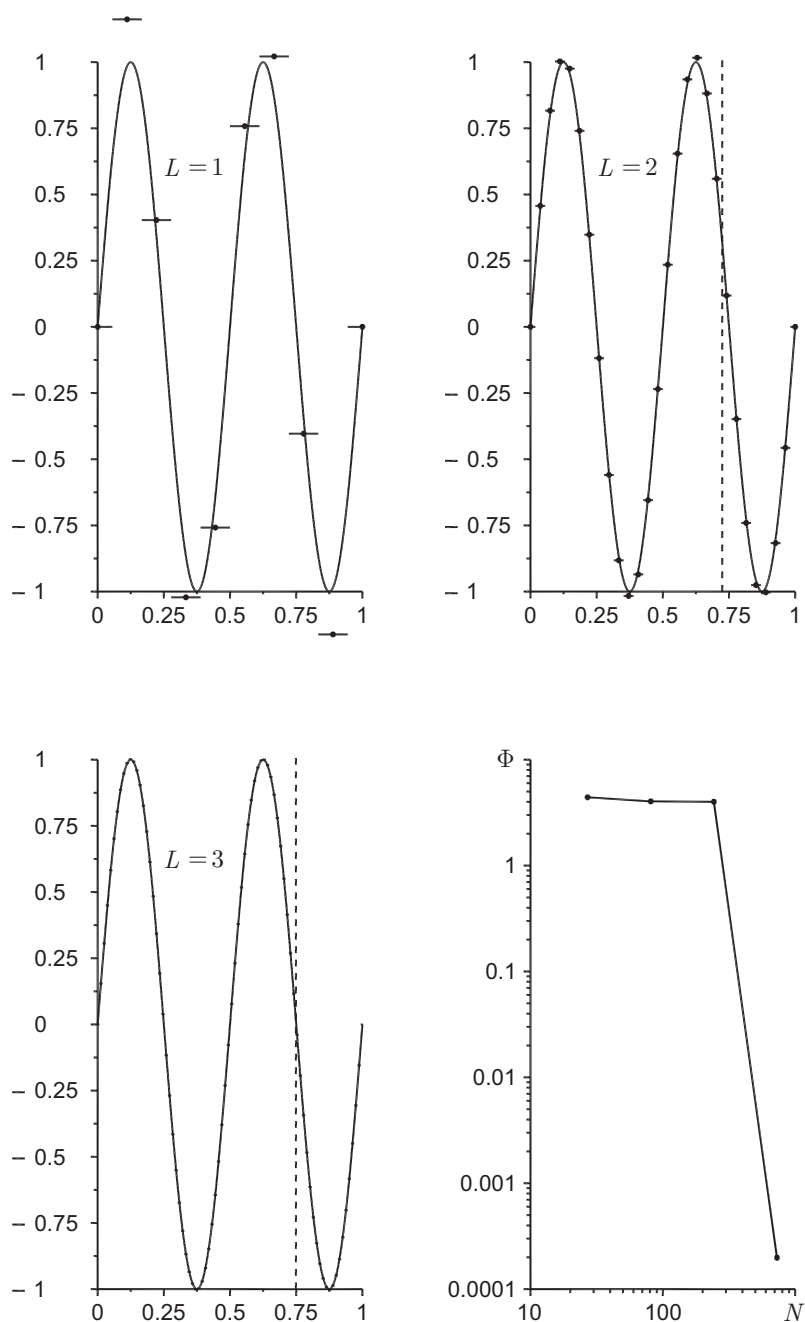


Рис. 6. Результаты вычислительного эксперимента

вание сходимости (по сетке) проводилось в каждом узле самой мелкой сетки, а не в отдельных узлах, как выполняют в традиционных алгоритмах. Данный вычислительный прием очень хорошо сочетается с многосеточными методами [28].

§ 4. Уравнение движения

Уравнения вычислительной макромеханики можно вывести двумя способами. Первый способ состоит в рассмотрении законов сохранения некоторой величины на выделенном конечном объеме. Второй способ состоит в интегрировании соответствующего дифференциального уравнения, полученного в континуальном приближении при формальном стягивании конечного объема в точку, по выделенному конечному объему. При этом следует помнить, что все функции постоянны в конечном объеме. Оба способа приводят к одинаковым результатам, но второй способ проще и удобнее.

Уравнение движения по X в системе Навье–Стокса имеет вид

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho uw)}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z}, \quad (4.1)$$

где связь между вязкими напряжениями и скоростями деформации задана соотношениями

$$\tau_{xx} = -\frac{2}{3}\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (4.2a)$$

$$\tau_{yx} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \quad (4.2b)$$

$$\tau_{zx} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right). \quad (4.2c)$$

Для наглядности положим, что вычислительная сетка является неразнесенной и равномерной, а конечный объем $\mathcal{V}_{ijk}^{(n)}$ для аппроксимации уравнений Навье–Стокса на данной сетке определен как (2.1). Интегрирование уравнения движения (4.1) по конечному объему $\mathcal{V}_{ijk}^{(n)}$ приводит к соотношению

$$\begin{aligned} & \frac{1}{h_t h_x h_y h_z} \int_{t_n^v}^{t_{n+1}^v} \int_{x_{i-1}^f}^{x_i^f} \int_{y_{j-1}^f}^{y_j^f} \int_{z_{k-1}^f}^{z_k^f} \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} dz dy dx dt + \\ & + \frac{1}{h_t h_x h_y h_z} \int_{t_n^v}^{t_{n+1}^v} \int_{x_{i-1}^f}^{x_i^f} \int_{y_{j-1}^f}^{y_j^f} \int_{z_{k-1}^f}^{z_k^f} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p - \tau_{xx}) dz dy dx dt + \\ & + \frac{1}{h_t h_x h_y h_z} \int_{t_n^v}^{t_{n+1}^v} \int_{x_{i-1}^f}^{x_i^f} \int_{y_{j-1}^f}^{y_j^f} \int_{z_{k-1}^f}^{z_k^f} \frac{\partial}{\partial y} (\rho uv - \tau_{yx}) dz dy dx dt + \\ & + \frac{1}{h_t h_x h_y h_z} \int_{t_n^v}^{t_{n+1}^v} \int_{x_{i-1}^f}^{x_i^f} \int_{y_{j-1}^f}^{y_j^f} \int_{z_{k-1}^f}^{z_k^f} \frac{\partial}{\partial z} (\rho uw - \tau_{zx}) dz dy dx dt = 0. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Рассмотрим аппроксимацию первого (нестационарного) члена:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{h_t h_x h_y h_z} \int_{t_n^v}^{t_{n+1}^v} \int_{x_{i-1}^f}^{x_i^f} \int_{y_{j-1}^f}^{y_j^f} \int_{z_{k-1}^f}^{z_k^f} \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} dz dy dx dt = \\ & = \frac{1}{h_x h_y h_z} \int_{t_n^v}^{t_n^f} \int_{x_{i-1}^f}^{x_i^f} \int_{y_{j-1}^f}^{y_j^f} \int_{z_{k-1}^f}^{z_k^f} \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} dz dy dx dt + \frac{1}{h_t h_x h_y h_z} \int_{t_n^f}^{t_{n+1}^v} \int_{x_{i-1}^f}^{x_i^f} \int_{y_{j-1}^f}^{y_j^f} \int_{z_{k-1}^f}^{z_k^f} \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} dz dy dx dt = \\ & = \frac{1}{h_x h_y h_z} \int_{x_{i-1}^f}^{x_i^f} \int_{y_{j-1}^f}^{y_j^f} \int_{z_{k-1}^f}^{z_k^f} \frac{(\rho u)^{(n+1)} - (\rho u)^{(n)}}{h_t} dz dy dx. \end{aligned}$$

Поскольку потоковая переменная $(\rho u)^{(n+1)}$ постоянна в конечном объеме \bar{V}_{ijk}

$$\bar{V}_{ijk} = \{(x, y, z) \mid x_{i-1}^f \leq x < x_i^f, y_{j-1}^f \leq y < y_j^f, z_{k-1}^f \leq z < z_k^f\},$$

то интеграл можно точно вычислить следующим образом

$$\frac{1}{h_t h_x h_y h_z} \int_{t_n^v}^{t_{n+1}^v} \int_{x_{i-1}^f}^{x_i^f} \int_{y_{j-1}^f}^{y_j^f} \int_{z_{k-1}^f}^{z_k^f} \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} dz dy dx dt = \frac{(\rho u)_{ijk}^{(n+1)} - (\rho u)_{ijk}^{(n)}}{h_t}.$$

Аналогично вычислим второй интеграл

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_2 &= \frac{1}{h_t h_x h_y h_z} \int_{t_n^v}^{t_{n+1}^v} \int_{x_{i-1}^f}^{x_i^f} \int_{y_{j-1}^f}^{y_j^f} \int_{z_{k-1}^f}^{z_k^f} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p - \tau_{xx}) dz dy dx dt = \\ &= \frac{1}{h_t h_x h_y h_z} \int_{t_n^f}^{t_n^f} \int_{x_{i-1}^f}^{x_i^f} \int_{y_{j-1}^f}^{y_j^f} \int_{z_{k-1}^f}^{z_k^f} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p - \tau_{xx}) dz dy dx dt + \\ &+ \frac{1}{h_t h_x h_y h_z} \int_{t_n^v}^{t_{n+1}^v} \int_{x_{i-1}^f}^{x_i^f} \int_{y_{j-1}^f}^{y_j^f} \int_{z_{k-1}^f}^{z_k^f} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p - \tau_{xx}) dz dy dx dt = \\ &= \frac{1}{2h_x h_y h_z} \int_{x_{i-1}^f}^{x_i^f} \int_{y_{j-1}^f}^{y_j^f} \int_{z_{k-1}^f}^{z_k^f} \left(\frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p - \tau_{xx})^{(n)} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p - \tau_{xx})^{(n+1)} \right) dz dy dx dt = \\ &= \frac{1}{2h_y h_z} \int_{y_{j-1}^f}^{y_j^f} \int_{z_{k-1}^f}^{z_k^f} \left((\rho u^2 + p - \tau_{xx})^{(n)} \Big|_{x_{i-1}^f} + (\rho u^2 + p - \tau_{xx})^{(n+1)} \Big|_{x_i^f} \right) dz dy dx dt - \\ &- \frac{1}{2h_y h_z} \int_{y_{j-1}^f}^{y_j^f} \int_{z_{k-1}^f}^{z_k^f} \left((\rho u^2 + p - \tau_{xx})^{(n)} \Big|_{x_{i-1}^f} + (\rho u^2 + p - \tau_{xx})^{(n+1)} \Big|_{x_{i-1}^f} \right) dz dy dx dt. \end{aligned}$$

Поскольку интегрируемая функция $\rho u^2 + p - \tau_{xx}$ постоянна внутри конечного объема \bar{V}_{ijk} , то

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_2 &= \frac{1}{2} (\rho u^2 + p - \tau_{xx})^{(n)} \Big|_{(x_i^f, y_j^v, z_k^v)} + \frac{1}{2} (\rho u^2 + p - \tau_{xx})^{(n+1)} \Big|_{(x_i^f, y_j^v, z_k^v)} - \\ &- \frac{1}{2} (\rho u^2 + p - \tau_{xx})^{(n)} \Big|_{(x_{i-1}^f, y_j^v, z_k^v)} - \frac{1}{2} (\rho u^2 + p - \tau_{xx})^{(n+1)} \Big|_{(x_{i-1}^f, y_j^v, z_k^v)} = \\ &= \frac{1}{2} (\rho u^2 + p)^{(n)}_{i+1jk} - \frac{1}{2} \tau_{xx} \Big|_{(x_i^f, y_j^v, z_k^v)}^{(n)} + \frac{1}{2} (\rho u^2 + p)^{(n+1)}_{i+1jk} - \frac{1}{2} \tau_{xx} \Big|_{(x_i^f, y_j^v, z_k^v)}^{(n+1)} - \\ &- \frac{1}{2} (\rho u^2 + p)^{(n)}_{i-1jk} + \frac{1}{2} \tau_{xx} \Big|_{(x_{i-1}^f, y_j^v, z_k^v)}^{(n)} - \frac{1}{2} (\rho u^2 + p)^{(n+1)}_{i-1jk} + \frac{1}{2} \tau_{xx} \Big|_{(x_{i-1}^f, y_j^v, z_k^v)}^{(n+1)}. \end{aligned}$$

Продолжая вычисление остальных интегралов в (4.3), получим уравнение движения в дисконтинуальном приближении. Еще раз подчеркнем, что различие между дисконтинуальным подходом и классическим методом конечных объемов состоит в постоянстве в конечном объеме функций, характеризующих среду и ее движение, и виде используемых феноменологических уравнений. В отдельных случаях (например, задачи теплопроводности),

уравнения математической модели в дисконтинуальном приближении совпадают с «сеточными» уравнениями, однако для конвективно-диффузионных задач есть различия в выражении для диффузионных потоков, обусловленные возможной вычислительной неустойчивостью.

Заключение

Математическое описание физико-химических процессов в дисконтинуальном приближении основано на фундаментальных законах сохранения (массы, импульса, энергии и др.) и феноменологических законах (Фурье, Фика, Ньютона и др.) при естественных ограничениях на минимальные пространственный и временной масштабы (1.11) и (1.12). Вычислительная макромеханика не только более точно соответствует имеющимся экспериментальным данным, но и существенно упрощает численное решение основополагающих уравнений, выражающих фундаментальные законы сохранения на конечных объемах используемой сетки. При этом фактически не используют такие понятия как «производная», «аппроксимация», «разностная (не)явная схема», «дифференциальное приближение» и др., широко используемые в традиционной вычислительной физике. Для диффузионных задач понятия «уравнения математической модели» и «разностная схема» совпадают.

Численное решение основополагающих уравнений математических моделей в дисконтинуальном приближении является кусочно-постоянной функцией, определенной на всей области, вне зависимости от количества узлов сетки. Точность полученных результатов зависит только от величины шага сетки, поэтому возможно сформулировать универсальные требования к сетке для достижения требуемой точности (аналог «сходимости по сетке»). Отсутствие интерполяции решения на всю область делает дисконтинуальное приближение привлекательным для использования в пакетах прикладных задач, устроенных по принципу «черного ящика».

Уравнения вычислительной макромеханики могут быть получены либо путем составления законов сохранения физических величин на каждом конечном объеме сетки, либо путем интегрирования известных дифференциальных уравнений в частных производных по конечным объемам сетки. Единственное отличие от традиционного метода конечных объемов состоит в постоянстве функций, описывающих свойства и движение среды, внутри соответствующих конечных объемов. Наиболее подходящими алгоритмами для решения уравнений вычислительной макромеханики являются геометрические многосеточные методы, в которых конечный объем на грубых сетках строят посредством агломерации конечных объемов на более мелких сетках [27, 28].

Отсутствие производных в описании физико-химических макропроцессов снижает требования к гладкости решений. Поэтому основные положения вычислительной макромеханики легко переносятся на задачи с разрывными решениями.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект «Разработка и приложение высокоэффективных параллельных алгоритмов для суперкомпьютерного моделирования сложных реагирующих течений», код проекта 21–51–46007) и Научного и технологического исследовательского совета Турции (TÜBİTAK), Grant no. ARDEB–220N170.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Самарский А. А., Михайлов А. П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. М.: Физматлит, 2005.
2. Mahian O., Kolsi L., Amani M., Estellé P., Ahmadi G., Kleinstreuer C., Marshall J. S., Taylor R. A., Abu-Nada E., Rashidi S., Niazmand H., Wongwises S., Hayat T., Kasaeian A., Pop I. Recent advances

- in modeling and simulation of nanofluid flows — Part II: Applications // *Physics Reports*. 2019. Vol. 791. P. 1–59. <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2018.11.003>
3. Mbroh N. A., Munyakazi J. B. A fitted operator finite difference method of lines for singularly perturbed parabolic convection–diffusion problems // *Mathematics and Computers in Simulation*. 2019. Vol. 165. P. 156–171. <https://doi.org/10.1016/j.matcom.2019.03.007>
 4. Wang Qian, Ren Yu-Xin, Pan Jianhua, Li Wanai. Compact high order finite volume method on unstructured grids III: Variational reconstruction // *Journal of Computational Physics*. 2017. Vol. 337. P. 1–26. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2017.02.031>
 5. Busto S., Dumbser M., Escalante C., Favrie N., Gavrilyuk S. On high order ADER discontinuous Galerkin schemes for first order hyperbolic reformulations of nonlinear dispersive systems // *Journal of Scientific Computing*. 2021. Vol. 87. Issue 2. Article number: 48. <https://doi.org/10.1007/s10915-021-01429-8>
 6. Яковлев В. И. Из истории механики жидкости и газа XVII–XIX веков // *Вестник Пермского университета. Математика. Механика. Информатика*. 2018. Вып. 1 (40). С. 74–82. <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=34861838>
 7. Лойцянский Л. Г. *Механика жидкости и газа*. М.: Дрофа, 2003.
 8. Blechta J., Málek J., Rajagopal K. R. On the classification of incompressible fluids and a mathematical analysis of the equations that govern their motion // *SIAM Journal on Mathematical Analysis*. 2020. Vol. 52. Issue 2. P. 1232–1289. <https://doi.org/10.1137/19M1244895>
 9. Себиси Т., Брэдшоу П. *Конвективный теплообмен. Физические основы и вычислительные методы*. М.: Мир, 1987.
 10. Gallagher I. From Newton to Navier–Stokes, or how to connect fluid mechanics equations from microscopic to macroscopic scales // *Bulletin of the American Mathematical Society*. 2019. Vol. 56. No. 1. P. 65–85. <https://doi.org/10.1090/bull/1650>
 11. Rachid M. Incompressible Navier–Stokes–Fourier limit from the Landau equation // *Kinetic and Related Models*. 2021. Vol. 14. Issue 4. P. 599–638. <https://doi.org/10.3934/krm.2021017>
 12. Han Guofeng, Liu Xiaoli, Huang Jin, Nawnit Kumar, Sun Liang. Modified Boltzmann equation and extended Navier–Stokes equations // *Physics of Fluids*. 2020. Vol. 32. Issue 2. 022001. <https://doi.org/10.1063/1.5139501>
 13. Bobylev A. V. Boltzmann equation and hydrodynamics beyond Navier–Stokes // *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 2018. Vol. 376. Issue 2118. 20170227. <https://doi.org/10.1098/rsta.2017.0227>
 14. Jang Juhi, Kim Chanwoo. Incompressible Euler limit from Boltzmann equation with diffuse boundary condition for analytic data // *Annals of PDE*. 2021. Vol. 7. Issue 2. Article number: 22. <https://doi.org/10.1007/s40818-021-00108-z>
 15. Патанкар С. *Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости*. М.: Энергоатомиздат, 1984.
 16. Патанкар С. В. *Численное решение задач теплопроводности и конвективного теплообмена при течении в каналах*. М.: Изд-во МЭИ, 2003.
 17. Самарский А. А. Уравнения параболического типа и разностные методы их решения // *Труды Всесоюзного совещания по дифференциальным уравнениям*, 1958. Ереван: Изд.-во АН АрмССР, 1960, с. 148–160.
 18. Федоренко Р. П. Релаксационный метод решения разностных эллиптических уравнений // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 1961. Т. 1. № 5. С. 922–927. <https://www.mathnet.ru/rus/zvmmf8014>
 19. Vanka S. P. Block-implicit multigrid solution of Navier–Stokes equations in primitive variables // *Journal of Computational Physics*. 1986. Vol. 65. Issue 1. P. 138–158. [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(86\)90008-2](https://doi.org/10.1016/0021-9991(86)90008-2)
 20. Svärd M. A new Eulerian model for viscous and heat conducting compressible flows // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 2018. Vol. 506. P. 350–375. <https://doi.org/10.1016/j.physa.2018.03.097>

21. Xu Shenren, Zhao Jiazi, Wu Hangkong, Zhang Sen, Müller J.-D., Huang Huang, Rahmati M., Wang Dingxi. A review of solution stabilization techniques for RANS CFD solvers // *Aerospace*. 2023. Vol. 10. Issue 3. 230. <https://doi.org/10.3390/aerospace10030230>
22. Heinz S. A mathematical solution to the computational fluid dynamics (CFD) dilemma // *Mathematics*. 2023. Vol. 11. Issue 14. 3199. <https://doi.org/10.3390/math11143199>
23. Deville M. O. Exact solutions of the Navier–Stokes equations // *An Introduction to the Mechanics of Incompressible Fluids*. Cham: Springer, 2022. P. 51–89. https://doi.org/10.1007/978-3-031-04683-4_3
24. Зезин В. Г. Механика жидкости и газа: учебное пособие. Челябинск: ЮУрГУ, 2016.
25. Caltagirone J.-P. An alternative to the concept of continuous medium // *Acta Mechanica*. 2021. Vol. 232. Issue 12. P. 4691–4703. <https://doi.org/10.1007/s00707-021-03070-w>
26. Самарский А. А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1989. <https://samarskii.ru/books/book1971.pdf>
27. Martynenko S. I. The robust multigrid technique: For black-box software. Berlin: De Gruyter, 2017. <https://doi.org/10.1515/9783110539264>
28. Martynenko S. I. Numerical methods for black-box software in computational continuum mechanics: Parallel high-performance computing. Berlin: De Gruyter, 2023. <https://doi.org/10.1515/9783111319568>

Поступила в редакцию 24.12.2023

Принята к публикации 15.02.2024

Мартыненко Сергей Иванович, д. ф.-м. н., в. н. с., Лаборатория физического моделирования двухфазных течений, Объединенный институт высоких температур РАН, 125412, Россия, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2;

с. н. с., Отдел горения и взрыва, ФИЦ проблем химической физики и медицинской химии РАН, 142432, Россия, Московская обл., г. Черноголовка, пр. Академика Семёнова, д. 1;

профессор, кафедра ЭЗ «Газотурбинные двигатели и комбинированные установки», МГТУ им. Н. Э. Баумана, 105005, Россия, г. Москва, ул. 2-я Бауманская, д. 5/1.

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6952-7888>

E-mail: martyn_s@mail.ru, Martynenko@icp.ac.ru

Цитирование: С. И. Мартыненко. Моделирование тепломассообмена в дисконтинуальном приближении // *Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки*. 2024. Т. 34. Вып. 1. С. 137–164.

S. I. Martynenko

Modeling of heat and mass transfer in the discontinuum approximation

Keywords: continuum medium, Knudsen number, phenomenological approach, mathematical modeling, heat and mass transfer.

MSC2020: 76A02, 676D05, 76M12

DOI: [10.35634/vm240109](https://doi.org/10.35634/vm240109)

The article presents a theoretical analysis of the governing equations expressing the fundamental conservation laws in the continuum and discontinuum approximations, and methods for solving problems of hydrodynamics as one of the most important subfields of continuum mechanics. This article is an attempt to more accurately describe physicochemical macro-processes. It is shown that the most suitable equations for computer modeling are the conservation laws under natural constraints on the minimum spatial and time scales, i.e., equations without partial derivatives and constraints on the solution smoothness. Using the continuity and thermal conductivity equations, a phenomenological method for constructing and numerically solving the governing equations is presented, and comparison with the traditional approach is given.

Funding. The work is funded by Russian Foundation for Basic Research (project «Development and application of high-performance parallel algorithms for supercomputer modeling of complex reaction flows», project code 21-51-46007) and Scientific and Technological Research Council of Türkiye (TÜBİTAK), Grant №: ARDEB-220N170.

REFERENCES

1. Samarskii A. A., Mikhailov A. P. *Matematicheskoe modelirovanie: Idei. Metody. Primery* (Mathematical modeling: Ideas. Methods. Examples), Moscow: Fizmatlit, 2005.
2. Mahian O., Kolsi L., Amani M., Estellé P., Ahmadi G., Kleinstreuer C., Marshall J. S., Taylor R. A., Abu-Nada E., Rashidi S., Niazmand H., Wongwises S., Hayat T., Kasaeian A., Pop I. Recent advances in modeling and simulation of nanofluid flows – Part II: Applications, *Physics Reports*, 2019, vol. 791, pp. 1–59. <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2018.11.003>
3. Mbroh N. A., Munyakazi J. B. A fitted operator finite difference method of lines for singularly perturbed parabolic convection–diffusion problems, *Mathematics and Computers in Simulation*, 2019, vol. 165, pp. 156–171. <https://doi.org/10.1016/j.matcom.2019.03.007>
4. Wang Qian, Ren Yu-Xin, Pan Jianhua, Li Wanai. Compact high order finite volume method on unstructured grids III: Variational reconstruction, *Journal of Computational Physics*, 2017, vol. 337, pp. 1–26. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2017.02.031>
5. Busto S., Dumbser M., Escalante C., Favrie N., Gavriluk S. On high order ADER discontinuous Galerkin schemes for first order hyperbolic reformulations of nonlinear dispersive systems, *Journal of Scientific Computing*, 2021, vol. 87, issue 2, article number: 48. <https://doi.org/10.1007/s10915-021-01429-8>
6. Yakovlev V. I. From the history of fluid mechanics 17–19th centuries, *Bulletin of Perm University. Mathematics. Mechanics. Computer science*, 2018, issue 1 (40), pp. 74–82. <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=34861838>
7. Loitsyanskii L. G. *Mekhanika zhidkosti i gaza* (Mechanics of liquid and gas), Moscow: Drofa, 2003.
8. Blechta J., Málek J., Rajagopal K. R. On the classification of incompressible fluids and a mathematical analysis of the equations that govern their motion, *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 2020, vol. 52, issue 2, pp. 1232–1289. <https://doi.org/10.1137/19M1244895>
9. Cebeci T., Bradshaw P. Physical and computational aspects of convective heat transfer. Berlin–Heidelberg: Springer, 1984. <https://doi.org/10.1007/978-3-662-02411-9>
10. Gallagher I. From Newton to Navier–Stokes, or how to connect fluid mechanics equations from microscopic to macroscopic scales, *Bulletin of the American Mathematical Society*, 2019, vol. 56, no. 1, pp. 65–85. <https://doi.org/10.1090/bull/1650>

11. Rachid M. Incompressible Navier–Stokes–Fourier limit from the Landau equation, *Kinetic and Related Models*, 2021, vol. 14, issue 4, pp. 599–638. <https://doi.org/10.3934/krm.2021017>
12. Han Guofeng, Liu Xiaoli, Huang Jin, Nawnit Kumar, Sun Liang. Modified Boltzmann equation and extended Navier–Stokes equations, *Physics of Fluids*, 2020, vol. 32, issue 2, 022001. <https://doi.org/10.1063/1.5139501>
13. Bobylev A. V. Boltzmann equation and hydrodynamics beyond Navier–Stokes, *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 2018, vol. 376, issue 2118, 20170227. <https://doi.org/10.1098/rsta.2017.0227>
14. Jang Juhi, Kim Chanwoo. Incompressible Euler limit from Boltzmann equation with diffuse boundary condition for analytic data, *Annals of PDE*, 2021, vol. 7, issue 2, article number: 22. <https://doi.org/10.1007/s40818-021-00108-z>
15. Patankar S. V. *Numerical heat transfer and fluid flow*, Boca Raton: CRC Press, 2018. <https://doi.org/10.1201/9781482234213>
16. Patankar S. V. *Computation of conduction and duct flow heat transfer*, Boca Raton: CRC Press, 2017. <https://doi.org/10.1201/9781315139951>
17. Samarskii A. A. Parabolic equations and difference methods for their solution, *Proceedings of All-Union Workshop on Differential Equations, 1958*, Yerevan: Academy of Sciences of Armenian Soviet Socialist Republic, 1960, pp. 148–160 (in Russian).
18. Fedorenko R. P. A relaxation method for solving elliptic difference equations // USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics, 1962, vol. 1, issue 4, pp. 1092–1096. [https://doi.org/10.1016/0041-5553\(62\)90031-9](https://doi.org/10.1016/0041-5553(62)90031-9)
19. Vanka S. P. Block-implicit multigrid solution of Navier–Stokes equations in primitive variables, *Journal of Computational Physics*, 1986, vol. 65, issue 1, pp. 138–158. [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(86\)90008-2](https://doi.org/10.1016/0021-9991(86)90008-2)
20. Svärd M. A new Eulerian model for viscous and heat conducting compressible flows, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2018, vol. 506, pp. 350–375. <https://doi.org/10.1016/j.physa.2018.03.097>
21. Xu Shenren, Zhao Jiazi, Wu Hangkong, Zhang Sen, Müller J.-D., Huang Huang, Rahmati M., Wang Dingxi. A review of solution stabilization techniques for RANS CFD solvers, *Aerospace*, 2023, vol. 10, issue 3, 230. <https://doi.org/10.3390/aerospace10030230>
22. Heinz S. A mathematical solution to the computational fluid dynamics (CFD) dilemma, *Mathematics*, 2023, vol. 11, issue 14, 3199. <https://doi.org/10.3390/math11143199>
23. Deville M. O. Exact solutions of the Navier–Stokes equations, *An Introduction to the Mechanics of Incompressible Fluids*, Cham: Springer, 2022, pp. 51–89. https://doi.org/10.1007/978-3-031-04683-4_3
24. Zezin V. G. *Mekhanika zhidkosti i gaza: uchebnoe posobie* (Mechanics of liquid and gas: textbook), Chelyabinsk: South Ural State University, 2016.
25. Caltagirone J.-P. An alternative to the concept of continuous medium, *Acta Mechanica*, 2021, vol. 232, issue 12, pp. 4691–4703. <https://doi.org/10.1007/s00707-021-03070-w>
26. Samarskii A. A. *The theory of difference schemes*, Boca Raton: CRC Press, 2001. <https://doi.org/10.1201/9780203908518>
27. Martynenko S. I. *The robust multigrid technique: For black-box software*, Berlin: De Gruyter, 2017. <https://doi.org/10.1515/9783110539264>
28. Martynenko S. I. *Numerical methods for black-box software in computational continuum mechanics: Parallel high-performance computing*, Berlin: De Gruyter, 2023. <https://doi.org/10.1515/9783111319568>

Received 24.12.2023

Accepted 15.02.2024

Sergei Ivanovich Martynenko, Doctor of Physics and Mathematics, Leading Researcher, Laboratory of Physical Modeling of Two-Phase Flows, Joint Institute for High Temperatures of the Russian Academy of Sciences, ul. Izhorskaya, 13, Bd. 2, Moscow, 125412, Russia;

Senior Researcher, Combustion and Explosion Department, Federal Research Center of Problems of Chemical Physics and Medicinal Chemistry of the Russian Academy of Sciences, pr. Akademika Semenova, 1, Chernogolovka, Moscow region, 142432, Russia;

Professor, Department “Gas Turbine Engines and Combined Plants”, Bauman Moscow State Technical University, ul. 2-ya Baumanskaya, 5/1, Moscow, 105005, Russia.

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6952-7888>

E-mail: martyn_s@mail.ru, Martynenko@icp.ac.ru

Citation: S.I. Martynenko. Modeling of heat and mass transfer in the discontinuum approximation, *Vestnik Udmurtskogo Universiteta. Matematika. Mekhanika. Komp'yuternye Nauki*, 2024, vol. 34, issue 1, pp. 137–164.