КАЗАНСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

**ИНСТИТУТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ
И ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ**

В.М. КОНЮХОВ

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС

по дисциплине

ВВЕДЕНИЕ
В
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Казань, 2020

СОДЕРЖАНИЕ

1. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

1.1. Способы изучения движения сплошных сред

1.1.1. Подход Лагранжа

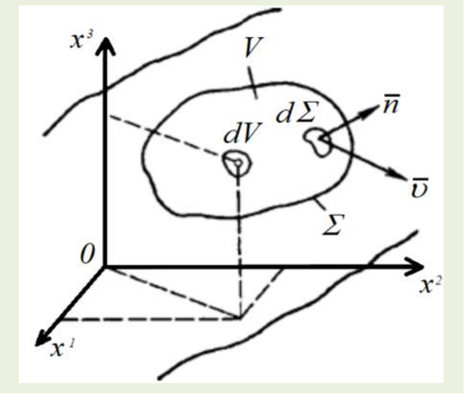
(Было)

1.1.2. Подход Эйлера

(Было)

1.2. Основные уравнения МСС в интегральной и дифференциальной формах

1.2.1. Закон сохранения массы СС в интегральной форме



Пусть V – некоторый объем СС, заполненные сплошной средой, $\mathbf{r}=(x_1,x_2,x_3)$ – радиус-вектор элемента объема dV относительно начала O декартовой системы координат (x_1,x_2,x_3). Частицы СС движутся со скоростью $\boldsymbol{\upsilon}(\mathbf{r},t)$, входят и выходят из объема V через его граничную поверхность Σ. Баланс массы СС в объеме V за время $\Delta t = t - t'$ выражается интегральным соотношением

$$\int_V \{\rho(\mathbf{r},t') - \rho(\mathbf{r},t)\} dV = -\int_t^{t'}\int_\Sigma \rho(\boldsymbol{\upsilon}\cdot\mathbf{n})\, d\Sigma dt, \qquad \mathbf{(1.1)}$$

где $\rho(\mathbf{r},t)$ – плотность СС, $\mathbf{n}$ – внешняя нормаль к поверхности Σ, правая часть (1.1) характеризует количество СС, покинувшей объем V через границу Σ за промежуток времени Δt.

1.2.2. Закон сохранения массы СС в дифференциальной форме.

С помощью формулы Остроградского-Гаусса преобразуем интеграл по поверхности Σ в интеграл по объему V и применим теорему о среднем к интегралу по времени

$$\int_V \{\rho(\mathbf{r},t') - \rho(\mathbf{r},t)\} dV + \Delta t \int_V \operatorname{div}(\rho\boldsymbol{\upsilon})\big|_{\bar{t}}\, dV = 0$$

где $\bar{t} \in [t,t']$. Поделим полученное соотношение на Δt. При $\Delta t \to 0$ будем иметь

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho\boldsymbol{\upsilon}) = 0 \qquad \mathbf{(1.2)}$$

– **уравнение неразрывности СС.**

1.2.3. Закон сохранения количества движения СС в интегральной форме

Пусть на сплошную среду действуют внешняя сила с объемной плотностью $\mathbf{F}(\mathbf{r},t)$, например, сила тяжести. Изменение количества движения СС в объеме V за время $\Delta t = t - t'$ происходит за счет действия силы $\mathbf{F}(\mathbf{r},t)$, потери (приобретения) импульса вследствие прихода (ухода) СС через границу Σ, а также вследствие взаимодействия среды внутри объема V со средой вне V. Это взаимодействие носит поверхностный характер. Соответствующая сила $\mathbf{P}$ может быть разложена на две составляющие, направленные вдоль нормального и касательного единичных векторов $\mathbf{n}$ и $\boldsymbol{\tau}$ в точке поверхности Σ: $\mathbf{P} = \mathbf{P}_n + \mathbf{P}_\tau$. Составляющая $\mathbf{P}_\tau$ обусловлена наличием вязких сил, возникающих из-за относительного движения слоев среды, соприкасающихся по поверхности Σ, а $\mathbf{P}_n = p\mathbf{n}$, где p – давление. В пренебрежении составляющей $\mathbf{P}_\tau$ изменение количества движение (импульса) СС в объеме V за промежуток времени $\Delta t = t - t'$ выражается интегральным соотношением

$$\int\limits_V \left\{\rho\boldsymbol{\upsilon}(\mathbf{r},t') - \rho\boldsymbol{\upsilon}(\mathbf{r},t)\right\} dV = -\int\limits_t^{t'}\int\limits_\Sigma \rho\boldsymbol{\upsilon}(\boldsymbol{\upsilon}\cdot\mathbf{n})\, d\Sigma dt - \int\limits_t^{t'}\int\limits_\Sigma p\mathbf{n}\, d\Sigma dt + \int\limits_t^{t'}\int\limits_V \rho\mathbf{F}(\mathbf{r},t)\, dV dt. \qquad \mathbf{(1.3)}$$

В отличие от уравнения (1.1) соотношение (1.3) является векторным, т.е. включает в себя три скалярных уравнения в проекциях на координатные оси x_1, x_2, x_3.

1.2.4. Закон сохранения количества движения СС в дифференциальной форме

Разложим вектор $\boldsymbol{\upsilon}$ на составляющие по направлениям осей x_1, x_2, x_3: $\boldsymbol{\upsilon} = \boldsymbol{\upsilon}_1 + \boldsymbol{\upsilon}_2 + \boldsymbol{\upsilon}_3$ и возьмем проекции уравнения (1.3) на эти оси. В каждом из трех уравнений преобразуем поверхностные интегралы в объемные, применим теорему о среднем к интегралу по времени, поделим полученные соотношения на Δt и, устремив Δt к нулю, получим:

$$\frac{\partial(\rho\upsilon_i)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho\upsilon_i\boldsymbol{\upsilon}) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho F_i, \quad i = 1,2,3.$$

С учетом уравнения неразрывности (1.2) преобразуем левые части этих соотношений

$$\rho\frac{\partial\upsilon_i}{\partial t} + \upsilon_i\frac{\partial\rho}{\partial t} + \upsilon_i \operatorname{div}(\rho\boldsymbol{\upsilon}) + \rho(\boldsymbol{\upsilon}\nabla)\upsilon_i = \rho\left\{\frac{\partial\upsilon_i}{\partial t} + (\boldsymbol{\upsilon}\nabla)\upsilon_i\right\},$$

где $\nabla = \operatorname{grad} = (\partial/\partial x_1, \partial/\partial x_2, \partial/\partial x_3)$. Тогда **скалярная дифференциальная форма закона сохранения количества движения**

$$\rho\left[\frac{\partial\upsilon_i}{\partial t} + (\boldsymbol{\upsilon}\nabla)\upsilon_i\right] = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho F_i, \quad i = 1,2,3 \qquad \mathbf{(1.4_1)}$$

может быть представлена также в **векторном виде**:

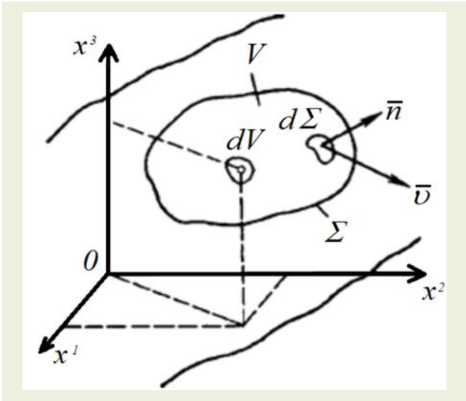
$$\rho\left[\frac{\partial\boldsymbol{\upsilon}}{\partial t} + (\boldsymbol{\upsilon}\nabla)\boldsymbol{\upsilon}\right] = -\nabla p + \rho\mathbf{F} \qquad \mathbf{(1.4_2)}$$

или (с учетом определения полной производной)

$$\rho\frac{d\boldsymbol{\upsilon}}{dt} = -\nabla p + \rho\mathbf{F}. \qquad \mathbf{(1.4_3)}$$

1.2.5. Закон сохранения полной энергии СС в интегральной форме

В рассматриваемом случае движения СС ***без учета сил трения*** полная энергия e сплошной среды представляет собой сумму внутренней (тепловой) энергии и кинетической (механической) энергии $\rho\upsilon^2/2$. При описании изменения полной энергии необходимо учесть возможный переход механической энергии в тепловую, а также обмен тепловой энергией между различными частицами сплошной среды. В дальнейшем ограничимся случаем, когда внутренняя энергия ε обусловлена только тепловыми процессами в СС. Для их описания вводятся специальные макромасштабные физические характеристики: удельная внутренняя энергия $\rho\varepsilon(\mathbf{r},t) \equiv \rho(x_1,x_2,x_3,t)\cdot\varepsilon(x_1,x_2,x_3,t)$, определяемая в каждой точке непрерывного континуума, и вектор теплового потока $\mathbf{W}(\mathbf{r},t)$, который возникает в точках границы Σ объема V.



Пусть $e = \rho\left(\varepsilon + \upsilon^2/2\right)$ – плотность полной энергии СС – скалярная величина, где ε и $\upsilon^2/2$ – объемная плотность соответственно ее внутренней и кинетической энергии. Тогда полная энергия СС в некоторый момент времени t внутри выбранного объема V равна $E = \int\limits_V e(\mathbf{r},t)\,dV$. Интегральный баланс полной энергии за промежуток времени $\Delta t = t - t'$ может быть представлен в виде:

$$\int\limits_V \{e(\mathbf{r},t') - e(\mathbf{r},t)\} dV = -\int\limits_t^{t'}\int\limits_\Sigma e(\boldsymbol{\upsilon}\cdot\mathbf{n})\,d\Sigma dt - \int\limits_t^{t'}\int\limits_\Sigma p(\boldsymbol{\upsilon}\cdot\mathbf{n})\,d\Sigma dt + \int\limits_t^{t'}\int\limits_V (\rho\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\upsilon})\,dVdt + \int\limits_t^{t'}\int\limits_V Q(\mathbf{r},t)\,dVdt - \int\limits_t^{t'}\int\limits_\Sigma (\mathbf{W}\cdot\mathbf{n})\,d\Sigma dt. \quad \mathbf{(1.5)}$$

Слагаемые правой части описывают изменение полной энергии за счет следующих факторов:

- потери (приобретения) энергии вследствие прихода (ухода) СС через границу Σ,
- работы поверхностных сил (давления p),
- работы объемной силы $\rho\mathbf{F}(\mathbf{r},t)$,
- объемных источников тепла плотностью $Q(\mathbf{r},t)$, распределенных по объему V,
- притока (ухода) тепловой энергии через поверхность Σ за счет процесса теплопроводности: $\mathbf{W}$ – вектор плотности теплового потока.

1.2.6. Закон сохранения полной энергии СС в дифференциальной форме

С помощью формулы Остроградского-Гаусса преобразуем интегралы по поверхности Σ в интегралы по объему V, применим теорему о среднем к интегралу по времени, взяв некоторое значение $\overline{t} \in [t,t']$ и поделим полученное соотношение на Δt.

$$\int\limits_V \{e(\mathbf{r},t')-e(\mathbf{r},t)\}dV+\Delta t\int\limits_V \mathrm{div}(e\boldsymbol{\upsilon})\big|_{\bar{t}}dV=-\Delta t\int\limits_V \mathrm{div}(p\boldsymbol{\upsilon})\big|_{\bar{t}}dV+\Delta t\int\limits_V (\rho\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\upsilon})\big|_{\bar{t}}dV+$$

$$+\Delta t\int\limits_V Q(\mathbf{r},t)\big|_{\bar{t}}\,dV-\Delta t\int\limits_V div\mathbf{W}(\mathbf{r},t)\big|_{\bar{t}}\,dV.$$

В итоге при $\Delta t\to 0$ будем иметь

$$\frac{\partial e}{\partial t}+\mathrm{div}(e\boldsymbol{\upsilon})=-\mathrm{div}(p\boldsymbol{\upsilon})+(\rho\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\upsilon})+Q-\mathrm{div}\mathbf{W}. \qquad \mathbf{(1.6_1)}$$

С учетом уравнения неразрывности преобразуем левую часть соотношения **(1.6₁)**:

$$\rho\frac{\partial}{\partial t}\left(\varepsilon+\frac{\upsilon^2}{2}\right)+\left(\varepsilon+\frac{\upsilon^2}{2}\right)\frac{\partial\rho}{\partial t}+\left(\varepsilon+\frac{\upsilon^2}{2}\right)\mathrm{div}(\rho\boldsymbol{\upsilon})+\rho(\boldsymbol{\upsilon}\nabla)\left(\varepsilon+\frac{\upsilon^2}{2}\right)=\rho\left\{\frac{\partial}{\partial t}\left(\varepsilon+\frac{\upsilon^2}{2}\right)+(\boldsymbol{\upsilon}\nabla)\left(\varepsilon+\frac{\upsilon^2}{2}\right)\right\}.$$

По определению выражение в фигурных скобках есть полная (субстанциональная) производная от функции $\varepsilon+\upsilon^2/2$:

$$\frac{d}{dt}\left(\varepsilon+\frac{\upsilon^2}{2}\right)=\frac{\partial}{\partial t}\left(\varepsilon+\frac{\upsilon^2}{2}\right)+(\boldsymbol{\upsilon}\nabla)\left(\varepsilon+\frac{\upsilon^2}{2}\right).$$

Тогда **вторая дифференциальная форма закона сохранения полной энергии**

$$\rho\left\{\frac{\partial}{\partial t}\left(\varepsilon+\frac{\upsilon^2}{2}\right)+(\boldsymbol{\upsilon}\nabla)\left(\varepsilon+\frac{\upsilon^2}{2}\right)\right\}=-\mathrm{div}(p\boldsymbol{\upsilon})+(\rho\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\upsilon})+Q-\mathrm{div}\mathbf{W} \qquad \mathbf{(1.6_2)}$$

или

$$\rho\frac{d}{dt}\left(\varepsilon+\upsilon^2/2\right)=-\mathrm{div}(p\boldsymbol{\upsilon})+(\rho\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\upsilon})+Q-\mathrm{div}\mathbf{W}. \qquad \mathbf{(1.6_3)}$$

Преобразуем теперь это уравнение с помощью уравнения сохранения импульса (1.4_3), скалярно умноженного на скорость $\boldsymbol{\upsilon}$:

$$\rho\left(\frac{d\boldsymbol{\upsilon}}{dt}\cdot\boldsymbol{\upsilon}\right)=-(\nabla p\cdot\boldsymbol{\upsilon})+(\rho\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\upsilon}).$$

Нетрудно убедиться в том, что $\left(\frac{d\boldsymbol{\upsilon}}{dt}\cdot\boldsymbol{\upsilon}\right)=\sum\limits_{i=1}^{3}\left\{\frac{d\upsilon_i}{dt}\cdot\upsilon_i\right\}=\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\sum\limits_{i=1}^{3}\{\upsilon_i\cdot\upsilon_i\}=\frac{1}{2}\frac{d(\boldsymbol{\upsilon}\cdot\boldsymbol{\upsilon})}{dt}=\frac{1}{2}\frac{d\upsilon^2}{dt}$,

где $\upsilon^2=\sum\limits_{i=1}^{3}\upsilon_i^2$ – квадрат модуля вектора скорости $\boldsymbol{\upsilon}$. В итоге будем иметь:

$$\frac{1}{2}\rho\frac{d\upsilon^2}{dt}=-(\nabla p\cdot\boldsymbol{\upsilon})+(\rho\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\upsilon}).$$

1.2.7. Закон сохранения внутренней энергии СС в дифференциальной форме

Учтем, что в уравнении (1.6_3) выражение $\mathrm{div}(p\boldsymbol{\upsilon})=p\mathrm{div}\boldsymbol{\upsilon}+\boldsymbol{\upsilon}\nabla p$, и, вычитая из него полученное выше уравнение, получим дифференциальную форму **закона сохранения внутренней энергии**:

$$\rho\frac{d\varepsilon}{dt}=-p\mathrm{div}\boldsymbol{\upsilon}+Q-\mathrm{div}\mathbf{W} \qquad \mathbf{(1.7_1)}$$

или

$$\rho\left\{\frac{\partial\varepsilon}{\partial t}+(\boldsymbol{\upsilon}\nabla)\varepsilon\right\}=-p\operatorname{div}\boldsymbol{\upsilon}+Q-\operatorname{div}\mathbf{W}. \qquad \mathbf{(1.7_2)}$$

1.3. Конкретизация модели СС

1.3.1. Уравнения состояния

Для замыкания уравнений СС вводятся уравнения состояния вида

$$\rho=\rho(p,T), \qquad \varepsilon=\varepsilon(p,T). \qquad \mathbf{(1.8)}$$

Примеры.

1) Плотность $\rho=\rho(p,T)$:

- $\rho=const$ – несжимаемая СС:
- $\rho=\dfrac{\rho_{am}}{p_{am}}p$ – идеальный изотермический газ;
- $\rho=\dfrac{p}{RT}$ – реальный неизотермический газ;
- или $\rho=\rho_{am}\left(\dfrac{p}{p_{am}}\right)^{\gamma}$ – реальный изотермический газ, где γ – коэффициент адиабаты, ρ_{am} – плотность газа при атмосферном давлении p_{am}, R – универсальная газовая постоянная;
- $\rho=\rho_*\left[1-\alpha_p(T-T_*)+\alpha_T(p-p_*)\right]$ – сжимаемая жидкость, где ρ_* – плотность жидкости при некоторых характерных значениях температуры T_* и давления p_*, α_p и α_T – коэффициенты теплового расширения и объемной упругости.

2) Внутренняя энергия $\varepsilon=\varepsilon(p,T)$ СС (газа, жидкости, твердого тела) часто определяется уравнением состояния

$$\varepsilon=C_V T, \qquad \mathbf{(1.9)}$$

где C_V – коэффициент теплоемкости среды.

После подстановки (1.8) в (1.7) система из семи уравнений (1.2), (1.4$_3$), (1.6$_3$) или (1.7$_1$), (1.8), (1.9)позволяет найти семь искомых функций ρ, p, υ_1, υ_2, υ_3, ε, T. Система является полной.

1.3.2. Граничные и начальные условия

Для замыкания построенной системы уравнений должны быть заданы граничные и начальные условия.

- *Граничные условия I-го рода* (условия Дирихле), например:

$T\big|_\Sigma=T_\Gamma$, $\quad p\big|_\Sigma=p_\Gamma$, где T_Γ и p_Γ – заданные на границе Σ функции.

- *Граничные условия II-го рода*, например:

$-K\left.\dfrac{\partial T}{\partial n}\right|_{\Sigma} = q$, где q – заданный на границе Σ тепловой поток (функция $\left.T\right|_{\Sigma}$ не известна).

В частном случае, если q=0, условие $\left.\dfrac{\partial T}{\partial n}\right|_{\Sigma} = 0$ называется условием Неймана.

- *Граничные условия III-го рода*, например:

$$-K\left.\frac{\partial T}{\partial n}\right|_{\Sigma} = \alpha\left(\left.T\right|_{\Sigma} - T_{\Gamma}\right).$$

Граничные условия могут быть нелинейными, например, когда $q = q(T)$. Так, при излучении на границе поток тепла по закону Стефана-Больцмана пропорционален 4-ой степени температуры:

$$K\left.\frac{\partial T}{\partial n}\right|_{\Sigma} = \sigma\left(\left.T^4\right|_{\Sigma} - T_{\Gamma}^4\right).$$

- *Условия сопряжения решения на границах разрыва среды (*их иногда называют *граничными условиями IV-го рода)*, например, когда в задачах теплопроводности $\left.K\right|_{\Sigma+0} \neq \left.K\right|_{\Sigma-0}$:

$$K\left.\frac{\partial T}{\partial n}\right|_{\Sigma+0} = K\left.\frac{\partial T}{\partial n}\right|_{\Sigma-0}, \quad \left.T\right|_{\Sigma+0} = \left.T\right|_{\Sigma-0}.$$

Более сложные условия ставятся на таких границах в задачах с фазовыми переходами (плавление, кристаллизация и т.д.). В этом случае превращение вещества из одной фазы в другую требует некоторого количества тепла L – скрытой теплоты фазового перехода, а сама граница может быть подвижной. Например, условие Стефана

$$K\left.\frac{\partial T}{\partial n}\right|_{\Sigma+0} - K\left.\frac{\partial T}{\partial n}\right|_{\Sigma-0} = \rho \upsilon L, \quad \left.T\right|_{\Sigma} = T_{\Phi},$$

где T_{Φ} – известная температура фазового перехода, $\upsilon = \partial\Sigma/\partial t$ – скорость движения границы. Положение подвижной границы должно быть найдено с использованием этих условий.

Начальные условия в нестационарных задачах моделируют исходное состояние СС в некоторый начальный момент времени $t = t_0$, например,

$$T(x,y,z,t_0) = T_0(x,y,z), \quad p(x,y,z,t_0) = p_0(x,y,z), \quad \upsilon_i(x,y,z,t_0) = 0, \quad i = 1,2,3.$$

ЛИТЕРАТУРА

1. *Самарский А.А.* Теория разностных схем. – М.: Наука, 2004.
2. *Самарский А.А., Попов Ю.П.* Разностные схемы газовой динамики. – М.: Наука, 2003. – 352 с.
3. *Калиткин М.И.* Численные методы. – М.: Наука, 2005. – 412 с.
4. Конюхов В.М. Дисперсные потоки в нефтяных скважинах. – Казань: Изд-во КГУ, 1990. – 160 с.
5. *Конюхов В.М., Храмченков М.Г.Чекалин А.Н.* Миграция разноплотностных жидкостей в водоносных пластах сложной структуры. – Изд-во Казанского математ. общества, Казань, 2005.
6. *Волков Ю.А., Конюхов В.М., Костерин А.В., Чекалин А.Н.* Математическое моделирование имплозионного воздействия на пласт. – Казань: Изд-во "Плутон", 2004. – 96 с.
7. *Мазо А.Б.* Математическое моделирование процессов горячей обработки металлов. – Изд-во Казанский фонд "Математика", 1996.
8. *Чекалин А.Н., Конюхов В.М., Костерин А.В.* Двухфазная многокомпонентная фильтрация в нефтяных пластах сложной структуры. – Казань: Изд–во Казанского гос. ун-та, 2009. – 180с.
9. *Карчевский М.М., Лапин А.В.* Некоторые вопросы теории метода конечных элементов. – Изд-во КГУ, 1995.