

材料加工理论与数值计算方法

**Material Processing Theory and Numerical
Calculation Methods**

讲义

v1.0

Copyright by Liu CAO (曹流)

曹流 博士

邮箱: caoliu@gzhu.edu.cn

个人主页: <https://caoliu0909.github.io/>

2022 年 10 月

守正笃实，久久为功。

——出自 2014 年 7 月时任北大校长王恩哥在本科生毕业典礼上的演讲

前言

起初并非奔着整理出本讲义的目标而来，而是想着将材料加工数值模拟所涉及的基础数学与物理知识做个简略的归纳，以便于下一步深入开展自己的科研工作，同时也为指导学生提供一个理论讲解大纲。然而，随着整理工作的推进，逐渐回忆起自己近十年针对材料加工数值模拟的学习历程，发现可供学习的中、英文教材很多，网上的各类学习资料更是数不胜数，但总体上存在两个明显的困境。

第一个困境是：对于从事材料加工数值模拟技术开发的学生，其学习的起点往往是所在课题组积累的资料，但由于绝大多数课题组已形成了成熟的研究方向，所积累的学习资料针对性很强，同时也意味着存在一定的片面性，导致学生所掌握的基础数学与物理知识存在一定的局限，进而影响其深入开展数值模拟技术开发。学习各类相关的中、英文教材是克服此困境的通用方法，但各个教材的关注点不一，而且单本教材往往就单个理论或技术的讲解较深，致使学生需要反复穿插于多本中、英文教材之间，以期建立起自己的完整知识架构，此过程需耗费极大的精力，而且往往难以取得较好的效果，我自己就对此深有感触。

第二个困境是：对于只是想利用数值模拟技术来辅助实验研究的学生，其往往会选择一款商用化软件，再找一本名为“某某软件从入门到精通”的软件操作书，依葫芦画瓢地开展针对自己所研究工艺的模拟仿真。由于这类学生几乎从未接触过材料加工数值模拟所涉及的基础数学与物理知识，导致其在操作软件过程中对很多设置似懂非懂，甚至无法判断计算结果的物理合理性，从而难以最大程度地发挥商用化软件作用，以致于很多从事实验研究的学生形成了数值模拟只是用来装装样子的认识。

本讲义以期为破解上述两个困境贡献出绵薄之力，故讲义的内容涉及数值模拟的三要素“数学基础—物理控制方程—数值计算方法”，本讲义想回答的最根本的问题是“各类描述物理规律的数学公式是如何被推导出来的？以及如何处理这些物理公式以预测各类现象”。本讲义取名为“材料加工理论与数值计算方法”，其实以目前的讲义内容来看，此名称取得过大了。一方面，几乎所有的制造方式（等材制造、减材制造以及增材制造）都可认为涉及材料加工，可见“材料加工理论”是何等的宽泛，而本讲义并未针对某个具体的材料加工工艺，而是推导了最为基本的热传导、流动与应力应变控制方程，并且只是针对热传导、流动以及应力应变所涉及的简单情形，另外，本讲义涉及了流变学与非牛顿流体本构模型，以开阔读者在本构模型方面的认识。另一方面，“数值计算方法”所包含的内容更是难以罗列，而本讲义只涉及了最常见的三种数值计算方法（有限差分法、有限体积法以及有限元法），并且主要关注这三类方法的基本思想。

本讲义之所以取如此泛的名称，一方面是希望不同专业领域的同学不会因为名称过于有针对性而觉得内容一定与自己无关，另一方面是希望本讲义的更新和完善工作能够一直持续下去。本讲义希望达到的目标是：讲清楚如何借助数学知识针对基本物理问题构建物理控制方程，以及讲清楚如何借助基本数值计算方法针对物理控制方程预测各类现象，进而帮助读者建立基本的、完整的材料加工数值模拟框架。因此，不管你是从事材料加工数值模拟技术开发的学生，或是想利用数值模拟技术来辅助实验研究的学生，都应该是本讲义的目标读者。对于第一类读者，先基于本讲义建立基本的数值模拟框架，将有助于下一步准确学习更深入的资料以及进一步开展有针对性的模拟技术开发。对于第二类读者，先基于本讲义建立基本的数值模拟框架，将有助于深刻认识商用化软件的底层思维，以更大限度地利用商用化软件。另外，本讲义对读者的前期知识要求不多，只需具备一定的高等数学与编程基础即可（大二及以后的学生即可满足要求）。如读者只对传热与流动感兴趣，可只看前七章内容，如对应力应变感兴趣，建议阅读全文。

虽然本讲义是由我个人整理而成，但其中所涉及的数学、物理以及数值计算知识均是基于多年来学习的各类资料，文中也尽可能地标注了引用来源。非得说本讲义有哪些内容是属于我自己的话，我觉得应当是我基于自己的理解、用自己的话将这些知识串联起来了。因此，不管是出于主观原因（如个人理解片面、引用格式不规范）或客观原因（如公式编辑出错），本讲义中出现错误是难以避免的，请对本讲义有疑问或发现本讲义有错误的读者能通过邮箱 caoliu@gzhu.edu.cn 与我联系，以共同完善本讲义，同时也欢迎大家传播本讲义。后续我也会不断发布本讲义的更新版本（发布方式见下文），并列出了有贡献的人员名单。

最后，能够完成本讲义的整理工作离不开我在华中科技大学材料学院九年的学习生活，文中的许多内容来源于本科时的专业课教材以及硕博期间课题组积累的相关学习资料，同时，也离不开近五年来在广州大学系统流变学研究所的工作积累。当然，本讲义绝对不是我与读者们在材料加工数值模拟道路上的终点，而应当是起点、扎实的起点！

曹流

2022年10月于广州

讲义下载地址及版权说明

(1) 讲义下载地址

读者可通过两种方式下载本讲义：一是百度网盘，二是我的个人主页。讲义后续的更新与完善也将通过这两种方式进行同步。

1) 通过百度网盘下载

百度网盘的下载链接和提取码如下（永久有效）：

链接：<https://pan.baidu.com/s/1onDnY6F70EBPlgeFCqtFXg?pwd=2022>

提取码：2022

百度网盘的下载二维码如下（使用微信扫描）：



2) 通过个人主页下载

查看我的个人主页 <https://caoliu0909.github.io/>即可下载。

(2) 版权说明

虽然本讲义的知识性内容来源于各类资料，但作者基于自己的理解、用自己的话将这些知识串联起来的工作也应受到知识产权的保护。因此，本讲义所有页面的页脚均添加了版权信息，希望读者在传播本讲义时能够以全文形式传播，另外，不得将本讲义用于任何盈利活动。

如需引用本讲义，可采用如下引用格式：

- 曹流. 材料加工理论与数值计算方法[R]. 广州：广州大学, 2022.
<https://pan.baidu.com/s/1onDnY6F70EBPlgeFCqtFXg?pwd=2022>.

讲义更新记录及有贡献人员名单

为持续地更新与完善本讲义，这里会对本讲义的更新情况进行记录，并列出于本讲义更新与完善有贡献的人员。请对本讲义有疑问、发现本讲义有错误或者希望在本讲义中添加内容的读者能通过邮箱 caoliu@gzhu.edu.cn 与我联系。

(1) 讲义更新记录

| 讲义版本 | 主要更新内容 | 时间 |
|------|--------|-------------|
| v1.0 | 正式发布 | 2022 年 10 月 |

(2) 有贡献人员名单

| 人员 | 贡献内容 | 时间 |
|----|--------------|-------------|
| 曹流 | 讲义 v1.0 全文整理 | 2022 年 10 月 |

Copyright by Liu CAO (曹流)

目 录

| | |
|-----------------------|-----|
| 前言 | I |
| 讲义下载地址及版权说明 | III |
| 讲义更新记录及有贡献人员名单 | IV |
| 零、数学基础 | 1 |
| 0.1 标量 | 1 |
| 0.2 矢量 | 1 |
| 0.3 哈密尔顿算子 | 3 |
| 0.4 梯度 | 3 |
| 0.5 散度 | 4 |
| 0.6 旋度 | 5 |
| 0.7 什么是张量 | 7 |
| 0.8 张量的运算 | 9 |
| 0.9 二阶张量的不变量和矩 | 11 |
| 一、热传导控制方程 | 13 |
| 二、流动控制方程 | 18 |
| 2.1 质量守恒方程 | 18 |
| 2.2 动量守恒方程 | 20 |
| 三、热对流控制方程 | 31 |
| 四、流变学与非牛顿流体本构模型 | 35 |
| 五、唯象本构模型 | 46 |
| 六、有限差分法 | 54 |
| 七、有限体积法 | 60 |
| 7.1 扩散项离散 | 61 |
| 7.2 对流项离散 | 64 |
| 7.3 瞬态项离散 | 65 |
| 7.4 源项离散 | 66 |
| 7.5 矩阵组装 | 67 |

| | |
|---------------------------|----|
| 八、应力与应变..... | 69 |
| 8.1 应力..... | 69 |
| 8.2 应变..... | 74 |
| 8.3 等效应力-等效应变曲线的简化模型..... | 77 |
| 九、（热）弹性/弹塑性力学控制方程..... | 80 |
| 9.1 应力平衡微分方程..... | 80 |
| 9.2 柯西方程..... | 80 |
| 9.3 应变协调方程..... | 81 |
| 9.4 弹性应力-应变关系..... | 82 |
| 9.5 热弹性应力-应变关系..... | 83 |
| 9.6 弹塑性应力-应变关系..... | 85 |
| 9.7 热弹塑性应力-应变关系..... | 87 |
| 9.8 (热)弹性/弹塑性力学控制方程..... | 88 |
| 9.9 金属材料的应力数值模拟研究..... | 90 |
| 十、有限单元法..... | 92 |

零、数学基础

0.1 标量

标量 (Scalar) [1] 是仅含有单个数值的量, 如温度、密度、压强、体积、质量、时间等。标量的运算不再赘述。

0.2 矢量

矢量 (Vector) [1] 是既有数值也有方向的物理量, 如速度、动量、力等。在笛卡尔坐标系下, 速度矢量 \vec{U} 可以写为 (矢量可视为列向量):

$$\vec{U} = u\vec{i} + v\vec{j} + w\vec{k} = \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} \quad [0.2.1]$$

矢量的量值 (模) 为:

$$|\vec{U}| = \sqrt{u^2 + v^2 + w^2} \quad [0.2.2]$$

矢量的和为:

$$\vec{U}_1 + \vec{U}_2 = (u_1 + u_2)\vec{i} + (v_1 + v_2)\vec{j} + (w_1 + w_2)\vec{k} = \begin{bmatrix} u_1 + u_2 \\ v_1 + v_2 \\ w_1 + w_2 \end{bmatrix} \quad [0.2.3]$$

标量乘以矢量为:

$$a\vec{U} = au\vec{i} + av\vec{j} + aw\vec{k} = \begin{bmatrix} au \\ av \\ aw \end{bmatrix} \quad [0.2.4]$$

矢量点乘矢量 (矢量点乘矢量的结果是一个标量, 在几何上反映的是一个向量在另一个向量上的投影, 量值上等于两个向量的模与两个向量的夹角的余弦的乘积):

$$\vec{U}_1 \cdot \vec{U}_2 = |\vec{U}_1| |\vec{U}_2| \cos(\vec{U}_1, \vec{U}_2) = \begin{bmatrix} u_1 \\ v_1 \\ w_1 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} u_2 \\ v_2 \\ w_2 \end{bmatrix} = [u_1 \quad v_1 \quad w_1] \begin{bmatrix} u_2 \\ v_2 \\ w_2 \end{bmatrix} = u_1 u_2 + v_1 v_2 + w_1 w_2 \quad [0.2.5]$$

矢量叉乘矢量 (矢量叉乘矢量的结果仍然是一个矢量, 它的方向由右手定则确定, 且垂直于两个矢量所确定的平面, 它的量值等于两个矢量的模与两个矢量

的夹角的正弦的乘积的绝对值，在几何上它反映的是两个矢量所形成的平行四边形的面积，图 0.2.1）：

$$|\bar{U}_3| = |\bar{U}_1 \times \bar{U}_2| = \|\bar{U}_1\| \|\bar{U}_2\| \sin(\bar{U}_1, \bar{U}_2) \quad [0.2.6]$$

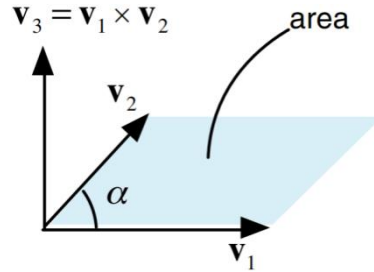


图 0.2.1 矢量叉乘矢量的几何意义

矢量叉乘矢量的行列式表示为：

$$\begin{aligned} \bar{U}_1 \times \bar{U}_2 &= \begin{vmatrix} \bar{i} & \bar{j} & \bar{k} \\ u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \end{vmatrix} = (v_1 w_2 - v_2 w_1) \bar{i} + (u_2 w_1 - u_1 w_2) \bar{j} + (u_1 v_2 - u_2 v_1) \bar{k} \\ &= \begin{bmatrix} v_1 w_2 - v_2 w_1 \\ u_2 w_1 - u_1 w_2 \\ u_1 v_2 - u_2 v_1 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad [0.2.7]$$

三个矢量的**混合乘积**（混合乘积为一个标量，代表了由这三个矢量所形成的平行六面体的体积，这三个矢量所形成的四面体的体积则可以通过该混合乘积乘以 1/6 得到，图 0.2.2）：

$$\begin{aligned} \bar{U}_3 \cdot (\bar{U}_1 \times \bar{U}_2) &= \begin{vmatrix} u_3 & v_3 & w_3 \\ u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \end{vmatrix} \\ &= u_3(v_1 w_2 - v_2 w_1) + v_3(u_2 w_1 - u_1 w_2) + w_3(u_1 v_2 - u_2 v_1) \end{aligned} \quad [0.2.8]$$

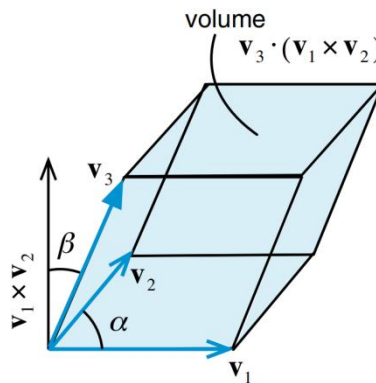


图 0.2.2 矢量混合乘积的几何意义

0.3 哈密尔顿算子

哈密尔顿算子 ∇ ^[1]用于计算某一物理量在三个坐标方向上的偏导数的矢量和。

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \bar{i} + \frac{\partial}{\partial y} \bar{j} + \frac{\partial}{\partial z} \bar{k} \quad [0.3.1]$$

0.4 梯度

当哈密尔顿算子作用于标量 T 时，即可得该标量在空间中的梯度（Gradient）^[1]（可以看作是标量乘以矢量），标量场的梯度是一个矢量场， ∇T 代表了空间中任意点上标量变化最大的方向和变化量， ∇T 垂直于该点处的等值线或等值面。以爬山为例，假设标量 T 代表海拔高度，那么你所占位置的梯度 ∇T 代表着最陡峭的方向以及该方向的斜率大小，最陡峭的方向一定与等海拔线相垂直（图 0.4.1）。当你所站位置的梯度 ∇T 为零，意味着你周围是一块平地。

$$\text{grad}T = \nabla T = T \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} = \frac{\partial T}{\partial x} \bar{i} + \frac{\partial T}{\partial y} \bar{j} + \frac{\partial T}{\partial z} \bar{k} \quad [0.4.1]$$



图 0.4.1 爬山

0.5 散度

当哈密尔顿算子与矢量 \bar{U} 点乘时，即可得该矢量场的散度（Divergence）^[1]

（可以看作是矢量点乘矢量），矢量场的散度是一个标量，矢量场的散度可用于表征空间各点矢量场发散的强弱程度，物理上，**散度的意义是场的有源性**。当散度大于 0，表示该点有散发通量的正源（发散源）；当散度小于 0，表示该点有吸收通量的负源（洞或汇）；当散度为 0，表示该点的矢量场场线没有发出也没有汇聚。当矢量 \bar{U} 代表空气速度时，某处的空气速度散度 $\nabla \cdot \bar{U}$ 决定着该处的空气处于膨胀、收缩或不膨胀不收缩中的哪个状态，当 $\nabla \cdot \bar{U} > 0$ 时，意味着该处的空气处于膨胀状态；当 $\nabla \cdot \bar{U} < 0$ 时，意味着该处的空气处于收缩状态；当 $\nabla \cdot \bar{U} = 0$ 时，意味着该处的空气处于既不膨胀也不收缩的状态。可见，速度散度 $\nabla \cdot \bar{U}$ 决定着该材料是否具有可压缩性，当 $\nabla \cdot \bar{U} \neq 0$ 时，意味着该材料是可压缩的；当 $\nabla \cdot \bar{U} = 0$ 时，意味着该材料是不可压缩的。

$$\operatorname{div} \bar{U} = \nabla \cdot \bar{U} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \quad [0.5.1]$$

标量的梯度为矢量，矢量的散度为标量，我们把“先梯度后散度”的操作合称为**拉普拉斯算子** ∇^2 或 Δ ，很明显，标量经过拉普拉斯算子运算以后仍是标量。拉普拉斯算子 Δ 的物理含义常常与**扩散现象**有关，温度的拉普拉斯算子 ΔT 代表着该处热量扩散的强度。

$$\nabla \cdot (\nabla T) = \nabla^2 T = \Delta T = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial T}{\partial x} \\ \frac{\partial T}{\partial y} \\ \frac{\partial T}{\partial z} \end{bmatrix} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad [0.5.2]$$

0.6 旋度

当哈密尔顿算子与矢量 \vec{U} 叉乘时，即可得该矢量场的旋度（Curl）^[1]（可以看作是矢量叉乘矢量），矢量场的旋度是一个矢量，矢量场的旋度代表了矢量做旋转运动的方向和强度。旋度向量的方向表示向量场在这一点附近旋转度最大的环量的旋转轴，它和向量旋转的方向满足**右手定则**。旋度向量的大小则是绕着这个旋转轴旋转的环量（矢量场沿曲线的积分）与旋转路径围成的微面元的面积之比。旋度是向量场的一种强度性质，就如同密度、浓度、温度一样。当矢量 \vec{U} 表示速度时，其旋度 $\nabla \times \vec{U}$ 的方向代表着该处旋转的方向，旋度 $\nabla \times \vec{U}$ 的大小代表着该处旋转的强度。以图 0.6.1 中的气流为例，飞机右翼引发的气流漩涡为逆时针旋转，所以漩涡中心处的旋度方向为垂直平面朝外，非漩涡中心处的旋度方向也是垂直平面朝外，漩涡中心处的旋度大小与非漩涡中心处的旋度不同（越靠近中心处越大）。同时，飞机左翼应当也引发了一个漩涡，旋转方向应该与右侧漩涡刚好相反（**翼尖涡流**，图 0.6.2）。以磁场中的磁感应强度 \vec{B} （矢量，用于描述磁场的强弱和方向）为例，磁感应强度的旋度 $\nabla \times \vec{B}$ 的大小一定不为 0，所以我们称**磁场是有旋场**（图 0.6.3）。以静电场中的电场强度 \vec{E} （矢量，用于描述电场的强弱和方向）为例，电场强度的旋度 $\nabla \times \vec{E}$ 的大小一定为 0，所以我们称**静电场是无旋场**（图 0.6.4）。需要额外指出的是，**感生电场是有旋场**，其又被称为**涡旋电场**，这里不做过多分析。

$$\text{curl}\vec{U} = \nabla \times \vec{U} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ u & v & w \end{vmatrix} = \left(\frac{\partial w}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial z} \right) \vec{i} + \left(\frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial w}{\partial x} \right) \vec{j} + \left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right) \vec{k} \quad [0.6.1]$$



图 0.6.1 农业飞机翼尖激起的气流

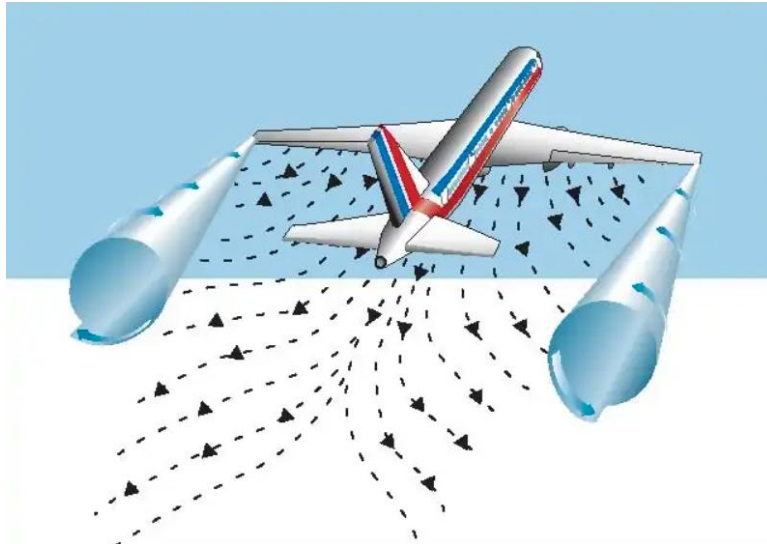


图 0.6.2 翼尖涡流

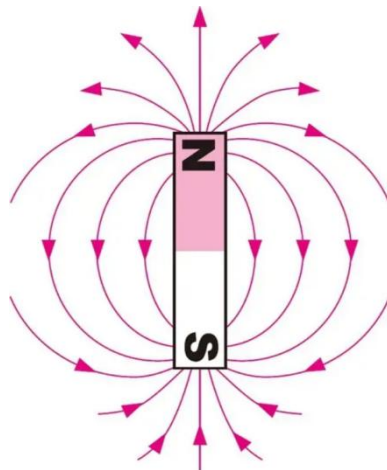


图 0.6.3 磁感线

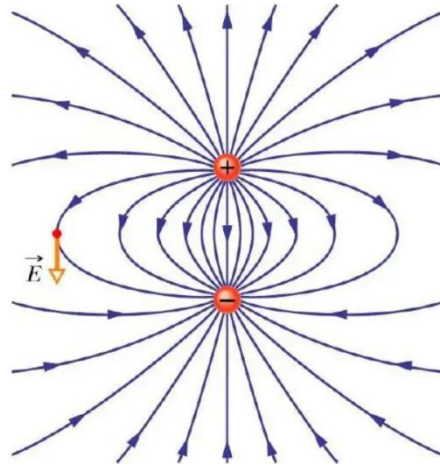


图 0.6.4 静电场

0.7 什么是张量

张量 (Tensor) [1] 是基于标量和矢量向更高维度的推广，它通过将一系列具有某种共同特征的数进行有序的组合来表示一个更加广义的“数”。其中，二阶张量在形式和性质上与二维矩阵有着高度的一致性，而在控制方程推导中绝大多数情况下所涉及的也都是二阶张量，如笛卡尔坐标系下的剪切应力张量 τ_{ij} ：

$$\tau_{ij} = \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix} \quad [0.7.1]$$

可以看出，二阶张量有 9 个分量，而三阶张量有 27 个分量，更一般的， n 阶张量有 3^n 个分量。可以认为**标量是零阶张量**，**矢量是一阶张量**。在表示各个分量时，如果一个一个的列出来是非常麻烦的，因此通过下标索引符号(如 i, j, k)，引入了更为简洁的**张量表示法**。

标量在张量表示法中没有下标或者说下标个数为 0，如温度 T ；矢量在张量表示法中有一个下标，如速度 u_i ；二阶张量在张量表示法中有两个下标，如剪切应力张量 τ_{ij} 。在三维笛卡尔坐标系中，下标 $i=1, 2, 3$ 、 $j=1, 2, 3$ ，同时，我们也可以视 $i=x, y, z$ 、 $j=x, y, z$ 。

自由标：在张量表示法中，当一个下标符号仅出现一次时，则该下标为自由标，须遍历该下标所有的取值。

- 当有且仅有一个自由标时，表示的是矢量：

$$\mathbf{u}_i = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = u_1 \bar{\mathbf{i}} + u_2 \bar{\mathbf{j}} + u_3 \bar{\mathbf{k}} = u \bar{\mathbf{i}} + v \bar{\mathbf{j}} + w \bar{\mathbf{k}} = \bar{\mathbf{U}} \quad [0.7.2]$$

$$\frac{\partial T}{\partial x_i} = \begin{bmatrix} \frac{\partial T}{\partial x_1} \\ \frac{\partial T}{\partial x_2} \\ \frac{\partial T}{\partial x_3} \end{bmatrix} = \frac{\partial T}{\partial x_1} \bar{\mathbf{i}} + \frac{\partial T}{\partial x_2} \bar{\mathbf{j}} + \frac{\partial T}{\partial x_3} \bar{\mathbf{k}} = \frac{\partial T}{\partial x} \bar{\mathbf{i}} + \frac{\partial T}{\partial y} \bar{\mathbf{j}} + \frac{\partial T}{\partial z} \bar{\mathbf{k}} = \mathbf{grad}T = \nabla T \quad [0.7.3]$$

- 当有且仅有两个自由标时，表示的是二阶张量，此时需要对 i 和 j 均进行遍历取值，从而得到 9 个分量：

$$\tau_{ij} = \begin{bmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} & \tau_{13} \\ \tau_{21} & \tau_{22} & \tau_{23} \\ \tau_{31} & \tau_{32} & \tau_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix} \quad [0.7.4]$$

哑标与爱因斯坦 (Einstein) 求和约定： 根据爱因斯坦求和约定，当下标重复出现两次时，则对该下标的索引项进行求和，该下标被称为哑标。

- 当有且仅有一个哑标时，表示的是一个标量：

$$a_i b_i = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 \quad [0.7.5]$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial u_3}{\partial x_3} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = \mathbf{div} \bar{\mathbf{U}} = \nabla \cdot \bar{\mathbf{U}} \quad [0.7.6]$$

- 当有且仅有一个自由标和一个哑标时，自由标和哑标均进行遍历，最终得到的是一个矢量：

$$a_{ij} b_j = \begin{bmatrix} a_{11} b_1 + a_{12} b_2 + a_{13} b_3 \\ a_{21} b_1 + a_{22} b_2 + a_{23} b_3 \\ a_{31} b_1 + a_{32} b_2 + a_{33} b_3 \end{bmatrix} \quad [0.7.7]$$

$$\frac{\partial(u_i u_j)}{\partial x_j} = \begin{bmatrix} \frac{\partial(u_1 u_1)}{\partial x_1} + \frac{\partial(u_1 u_2)}{\partial x_2} + \frac{\partial(u_1 u_3)}{\partial x_3} \\ \frac{\partial(u_2 u_1)}{\partial x_1} + \frac{\partial(u_2 u_2)}{\partial x_2} + \frac{\partial(u_2 u_3)}{\partial x_3} \\ \frac{\partial(u_3 u_1)}{\partial x_1} + \frac{\partial(u_3 u_2)}{\partial x_2} + \frac{\partial(u_3 u_3)}{\partial x_3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial(uu)}{\partial x} + \frac{\partial(uv)}{\partial y} + \frac{\partial(uw)}{\partial z} \\ \frac{\partial(vu)}{\partial x} + \frac{\partial(vv)}{\partial y} + \frac{\partial(vw)}{\partial z} \\ \frac{\partial(wu)}{\partial x} + \frac{\partial(wv)}{\partial y} + \frac{\partial(ww)}{\partial z} \end{bmatrix} \quad [0.7.8]$$

- 当有多个自由标和多个哑标时，张量展开的原则与上述情况相同，只是更加复杂，通常的展开顺序是首先对哑标索引项进行连续展开求和，然后对自由标进行展开：

$$\varepsilon_{ijk} \frac{\partial u_k}{\partial x_j} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{111} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \varepsilon_{112} \frac{\partial u_2}{\partial x_1} + \varepsilon_{113} \frac{\partial u_3}{\partial x_1} + \varepsilon_{121} \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \varepsilon_{122} \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \varepsilon_{123} \frac{\partial u_3}{\partial x_2} + \varepsilon_{131} \frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \varepsilon_{132} \frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \varepsilon_{133} \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \\ \varepsilon_{211} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \varepsilon_{212} \frac{\partial u_2}{\partial x_1} + \varepsilon_{213} \frac{\partial u_3}{\partial x_1} + \varepsilon_{221} \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \varepsilon_{222} \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \varepsilon_{223} \frac{\partial u_3}{\partial x_2} + \varepsilon_{231} \frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \varepsilon_{232} \frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \varepsilon_{233} \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \\ \varepsilon_{311} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \varepsilon_{312} \frac{\partial u_2}{\partial x_1} + \varepsilon_{313} \frac{\partial u_3}{\partial x_1} + \varepsilon_{321} \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \varepsilon_{322} \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \varepsilon_{323} \frac{\partial u_3}{\partial x_2} + \varepsilon_{331} \frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \varepsilon_{332} \frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \varepsilon_{333} \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \end{bmatrix} \quad [0.7.9]$$

(注: $\varepsilon_{ijk} \frac{\partial u_k}{\partial x_j}$ 表示的是一个矢量, 事实上, 结合 ε_{ijk} 符号的定义, $\varepsilon_{ijk} \frac{\partial u_k}{\partial x_j}$ 就是流

场的旋度。)

有几点需要注意的是:

- 自由标的个数决定了该张量的阶数, 当自由标个数为 0 时, 该张量为 0 阶, 即标量; 当自由标个数为 1 时, 该张量为 1 阶, 即矢量; 当自由标个数为 2 时, 该张量为二阶张量; 依此类推。
- 张量的表示法中所说的下标个数的统计均是在一个独立的项之内完成的, 如 $a_i b_j$ (结果为二阶张量)。通过“+”号或“-”号连接的表达式不可合并在一起进行展开, 如 $a_i + b_j$ (就是两个矢量相加, 结果为矢量)。
- 如果在一个独立的项中某个下标重复出现了三次或以上呢? 说明写错了, 张量中不会出现重复三次及以上的下标。

0.8 张量的运算

矢量的并矢积 $\bar{U} \otimes \bar{U}$ 或 $\bar{U}\bar{U}$: 将两个矢量的各个方向进行并置, 从而得到一个二阶张量^[1]。

$$\bar{U} \otimes \bar{U} = \bar{U}\bar{U} = \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} [u \quad v \quad w] = \begin{bmatrix} uu & uv & uw \\ vu & vv & vw \\ wu & wv & ww \end{bmatrix} = u_i u_j \quad [0.8.1]$$

矢量的梯度 $\nabla \otimes \bar{U}$ 或 $\nabla \bar{U}$: 运算与矢量的并矢积一致, 结果是一个二阶张量。

$$\nabla \otimes \bar{U} = \nabla \bar{U} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} [u \quad v \quad w] = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial w}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial w}{\partial y} \\ \frac{\partial u}{\partial z} & \frac{\partial v}{\partial z} & \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix} = \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad [0.8.2]$$

(下标 i 代表行, 下标 j 代表列)

张量相加:

$$\sigma + \tau = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} + \tau_{xx} & \sigma_{xy} + \tau_{xy} & \sigma_{xz} + \tau_{xz} \\ \sigma_{yx} + \tau_{yx} & \sigma_{yy} + \tau_{yy} & \sigma_{yz} + \tau_{yz} \\ \sigma_{zx} + \tau_{zx} & \sigma_{zy} + \tau_{zy} & \sigma_{zz} + \tau_{zz} \end{bmatrix} = \sigma_{ij} + \tau_{ij} \quad [0.8.3]$$

标量乘以张量:

$$a\tau = \begin{bmatrix} a\tau_{xx} & a\tau_{xy} & a\tau_{xz} \\ a\tau_{yx} & a\tau_{yy} & a\tau_{yz} \\ a\tau_{zx} & a\tau_{zy} & a\tau_{zz} \end{bmatrix} = a\tau_{ij} \quad [0.8.4]$$

张量点乘矢量:

$$\tau \cdot \bar{U} = \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tau_{xx}u + \tau_{xy}v + \tau_{xz}w \\ \tau_{yx}u + \tau_{yy}v + \tau_{yz}w \\ \tau_{zx}u + \tau_{zy}v + \tau_{zz}w \end{bmatrix} = \tau_{ij}u_j \quad [0.8.5]$$

矢量点乘张量:

$$\bar{U} \cdot \tau = \begin{bmatrix} u & v & w \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} u\tau_{xx} + v\tau_{yx} + w\tau_{zx} \\ u\tau_{xy} + v\tau_{yy} + w\tau_{zy} \\ u\tau_{xz} + v\tau_{yz} + w\tau_{zz} \end{bmatrix} = u_i\tau_{ij} \quad [0.8.6]$$

(由式[0.8.5]和式[0.8.6]可知, 当张量 τ_{ij} 为对称张量时, $\tau \cdot \bar{U} = \bar{U} \cdot \tau$; 当张量 τ_{ij} 为非对称张量时, $\tau \cdot \bar{U} \neq \bar{U} \cdot \tau$ 。)

张量的散度:

$$\nabla \cdot \tau = \left(\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix} \right)^T = \begin{bmatrix} \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \\ \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} \\ \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \end{bmatrix} = \frac{\partial \tau_{ji}}{\partial x_j} \quad [0.8.7]$$

两个张量的点乘 (结果为张量):

$$\sigma \cdot \tau = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix} = \sigma_{ik}\tau_{kj} \quad [0.8.8]$$

$$(\bar{A}\bar{B}) \cdot (\bar{C}\bar{D}) = (\bar{B} \cdot \bar{C})(\bar{A}\bar{D}) \quad [0.8.9]$$

张量的双点积 (结果为标量, 即两个张量的点乘所得到张量的对角线代数和):

$$(\bar{A}\bar{B}):(\bar{C}\bar{D})=(\bar{A}\cdot\bar{D})(\bar{B}\cdot\bar{C}) \quad [0.8.10]$$

$$\begin{aligned} (\bar{i}\bar{i}):(\bar{i}\bar{i}) &= (\bar{i}\bar{j}):(\bar{j}\bar{i}) = (\bar{i}\bar{k}):(\bar{k}\bar{i}) = 1 \\ (\bar{i}\bar{i}):(\bar{i}\bar{j}) &= (\bar{i}\bar{j}):(\bar{j}\bar{j}) = (\bar{i}\bar{k}):(\bar{k}\bar{j}) = 0 \end{aligned} \quad [0.8.11]$$

$$\sigma:\tau = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} : \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix} \quad [0.8.12]$$

$$\begin{aligned} &= \sigma_{xx}\tau_{xx} + \sigma_{xy}\tau_{yx} + \sigma_{xz}\tau_{zx} + \sigma_{yx}\tau_{xy} + \sigma_{yy}\tau_{yy} + \sigma_{yz}\tau_{zy} + \sigma_{zx}\tau_{xz} + \sigma_{zy}\tau_{yz} + \sigma_{zz}\tau_{zz} \\ &= \sigma_{ij}\tau_{ji} \end{aligned}$$

0.9 二阶张量的不变量和矩

针对笛卡尔坐标系下的二阶张量，当坐标系发生变化时，该张量的各个元素值会随之发生变化，但是，如果对该张量进行一定的运算，可以得到一些不随坐标系变化而变化的标量，这种标量被称为**张量的标量不变量**，简称为**张量的不变量**^[2]。

这里以应力张量 $\tau_{ij} = \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix}$ 为例（假设为对称张量）。二阶张量有三

个主不变量：

$$I_1 = \tau_{ii} = \tau_{xx} + \tau_{yy} + \tau_{zz} \quad [0.9.1]$$

$$\begin{aligned} I_2 &= \frac{1}{2}(\tau_{ii}\tau_{jj} - \tau_{ij}\tau_{ji}) \\ &= \frac{1}{2}(\tau_{xx}^2 + \tau_{yy}^2 + \tau_{zz}^2 + 2\tau_{xx}\tau_{yy} + 2\tau_{xx}\tau_{zz} + 2\tau_{yy}\tau_{zz}) - \frac{1}{2}(\tau_{xx}^2 + \tau_{yy}^2 + \tau_{zz}^2 + 2\tau_{xy}^2 + 2\tau_{xz}^2 + 2\tau_{yz}^2) \\ &= \tau_{xx}\tau_{yy} + \tau_{xx}\tau_{zz} + \tau_{yy}\tau_{zz} - \tau_{xy}^2 - \tau_{xz}^2 - \tau_{yz}^2 \end{aligned} \quad [0.9.2]$$

$$I_3 = \det(\tau) = \tau_{xx}\tau_{yy}\tau_{zz} + 2\tau_{xy}\tau_{xz}\tau_{yz} - \tau_{xx}\tau_{yz}^2 - \tau_{yy}\tau_{xz}^2 - \tau_{zz}\tau_{xy}^2 \quad [0.9.3]$$

I_1, I_2, I_3 分别被称为第一、第二、第三不变量，事实上，第一不变量 I_1 为二阶张量对角线元素和；第二不变量 I_2 为将二阶张量拆成 3 个 2×2 矩阵的行列式之和；第三不变量 I_3 为二阶张量的行列式。需要说明的是，并不是只有二阶对称张量才有不变量，式[0.9.1]~式[0.9.3]只是以二阶对称张量为例，给出了其三个不变量，所有的二阶张量都有三个不变量。

另外，对于二阶张量而言，还有所谓的**矩**的概念，即二阶张量 τ 的 n 阶矩指的是 n 个二阶张量 τ 点乘后所得张量的对角线元素之和。通常，我们比较关心二阶张量的一阶矩 I 、二阶矩 II 、三阶矩 III ，而且，二阶张量的矩与二阶张量的不变量具有转换关系（可见，二阶张量的矩也是不变量）：

$$I = \text{tr}(\tau) = I_1 \quad [0.9.4]$$

$$\text{II} = \text{tr}(\tau \cdot \tau) = (I_1)^2 - 2I_2 \quad [0.9.5]$$

$$\text{III} = \text{tr}(\tau \cdot \tau \cdot \tau) = (I_1)^3 - 3I_1I_2 + 3I_3 \quad [0.9.6]$$

$$I_1 = I \quad [0.9.7]$$

$$I_2 = \frac{1}{2}(I^2 - \text{II}) \quad [0.9.8]$$

$$I_3 = \frac{1}{6}I^3 - \frac{1}{2}I \cdot \text{II} + \frac{1}{3}\text{III} \quad [0.9.9]$$

二阶张量还有的一个性质是：**二阶对称张量存在三个主轴和三个主值**，如果取主轴为坐标轴，则两个下角标不同的分量都将为零，留下两个下角标相同的三个分量，即主值。在固体力学分析中，常常利用此性质以实现简便分析应力状态的目的。

参考资料：

- [1] <https://www.zhihu.com/column/cfdnotebook>.
- [2] 二阶张量的不变量.ppt
- [3] 图片来源于《The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics: An Advanced Introduction with OpenFOAM and Matlab》以及网络.

一、热传导控制方程

所谓**控制方程**，就是描述事物运行规律的数学表达式，比如我们初中学习的牛顿第二定律 $\bar{F} = m\bar{a}$ 就是控制方程，再比如我们采用物理量 z 来定量化描述某个物理现象，发现 z 的影响因素有 x 和 y ，于是我们建立了一个方程式 $z = f(x, y)$ 来描述 z 与 x 、 y 的关系，这种我们经常见到的函数关系式其实就是控制方程。但是当我们在描述实际现象时，比如说我们将热水倒入茶杯后，把茶杯放入冰箱，想知道水的温度是如何随时间变化的（我们认为茶杯中的水没有发生流动），我们发现很难用一个简单的公式来描述这个现象，一方面，各处的水温变化是不一样的，而且从严格意义上讲一杯水中含有无限多个点，难道我们要写出无限多个方程式？另一方面，用圆柱形的茶杯盛水和用方形的茶杯盛水，水温的变化应该是不一样的，难道我们还需要在控制方程中考虑茶杯的形状？那控制方程就无穷无尽了！

接着考虑上面的问题，不管我们用圆柱形的茶杯盛水，还是用方形的茶杯盛水，也不管我们用铁茶杯，还是用塑料茶杯，甚至不管我们是盛水，还是盛食用油，这些应该属于同一类问题，那么这一类问题本质上的变化规律应该是一致的。于是，我们需要找到这一类问题的本质，进而只要描述清楚这个本质（构建控制方程），那么不管我们碰到这一类问题中具体的哪一个，我们应该都可以解决了。思考到这里，可能有些读者还是似懂非懂，这是因为一直以来我们习惯了**宏观思维**，宏观世界中的现象千变万化，会给我们一件事情与另一件事情差别很大的错觉，比如不锈钢可以用来制造筷子和碗，也可以用来制造自行车和汽车，甚至可以用来制造飞船，但从微观层面上来看不锈钢还是不锈钢，并没有什么不同。讲到这里，如果读者已经学习过微积分课程，就应该开始明白微积分与物理的关系了，简单来说，微积分包含了一大类数学工具，我们可以**利用微积分工具从微观层面上认识事物运行的本质**，这也是为什么接下来我们得到的各类控制方程都是微分方程。至于从微观层面上认识清楚事物本质之后，怎么才能预测宏观情形呢？这是后面**数值计算方法**所要回答的问题。所以，最开始我们要弄清楚怎么构建微分控制方程来描述微观层面的事物运行规律。

在构建各类控制方程之前，我们需要先了解几个控制方程推导过程中所涉及的基本操作：

- **微元体**

因为我们要从微观层面上来认识事物运行的规律，那么我们的研究对象就不

能是某个具体的实际物品（如茶杯），而是一个微元体。这个微元体其实就是一个长方体（图 1.1），这个长方体的各个面与相应的坐标轴垂直，长方体的长、宽、高（即三个方向上的长度）分别为 δx 、 δy 、 δz 。 δx 、 δy 和 δz 可以被认为就是三个很小的正数，需要说明的是， δx 与微积分里的微分 dx 是不一样的概念， dx 被认为是无限趋近于 0 但又大于 0 的数，但并不要求 δx 无限趋近于 0。很明显，微元体的体积为 $\delta x \delta y \delta z$ ，微元体的侧面面积为 $\delta y \delta z$ 、 $\delta x \delta z$ 、 $\delta x \delta y$ 。

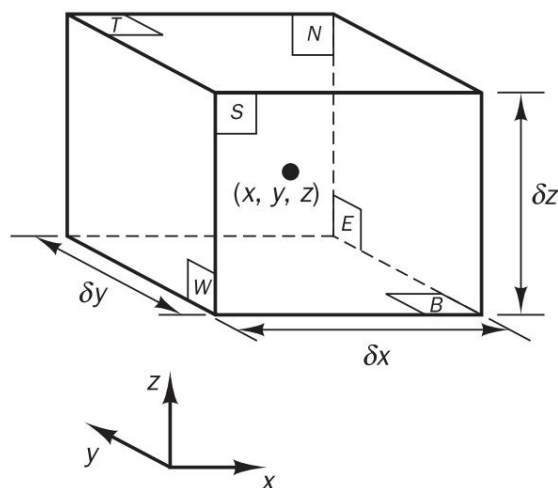


图 1.1 微元体

● 微元体内线性变化假设

因为我们取的微元体是很小的区域，因此，我们有理由认为物理量在这个很小区域内的变化是线性的。以物理量温度 T 为例，我们设微元体中心的坐标为 (x, y, z) ，微元体中心的温度值为 $T(x, y, z)$ ，我们希望借助 $T(x, y, z)$ 得到右侧面中心的温度值 $T\left(x + \frac{1}{2}\delta x, y, z\right)$ 。于是我们认为温度在微元体中心到右侧面中心之间是线性变化的，其变化斜率为 $\frac{\partial T}{\partial x}$ ，于是我们可得右侧面中心的温度值为：

$$T\left(x + \frac{1}{2}\delta x, y, z\right) = T(x, y, z) + \frac{\partial T}{\partial x} \cdot \frac{1}{2}\delta x \quad [1.1]$$

很显然，左侧面中心的温度值为：

$$T\left(x - \frac{1}{2}\delta x, y, z\right) = T(x, y, z) - \frac{\partial T}{\partial x} \cdot \frac{1}{2}\delta x \quad [1.2]$$

其他四个面的中心的温度值也可以容易得到。

● 微元面内均匀分布假设

一个微元体含有 6 个微元面。构建控制方程过程中，我们可能会碰到对微元

面求积分的操作，比如我们知道右侧面中心的 X 方向速度大小为 u ，我们希望计算通过右侧面流进或流出的流量。于是，我们认为右侧面上所有点的 X 方向速度大小的平均值就是右侧面中心的 X 方向速度大小 u ，因此，这个积分的结果就是 $u\delta y\delta z$ 。

接下来，我们正式进入各类控制方程的推导。首先，我们推导热传导方程，即如何从微观层面上描述热传导现象。热传导方程的本质是能量守恒定律，能量守恒定律可表示为：

【微元体的能量变化】 = 【通过微元面交换的能量】 + 【微元体自身产生的能量】

图 1.2 是我们针对热传导问题所建立的微元体，其中，我们设微元体中心的热流密度（矢量，物理含义为单位面积单位时间所通过的热量）在三个正方向上的分量分别为 q_x 、 q_y 、 q_z 。考虑到只有垂直于微元面的热流密度分量才能导入或导出热量，于是我们很容易计算出 6 个微元面中心与自身垂直的热流密度分量值（图 1.2）。

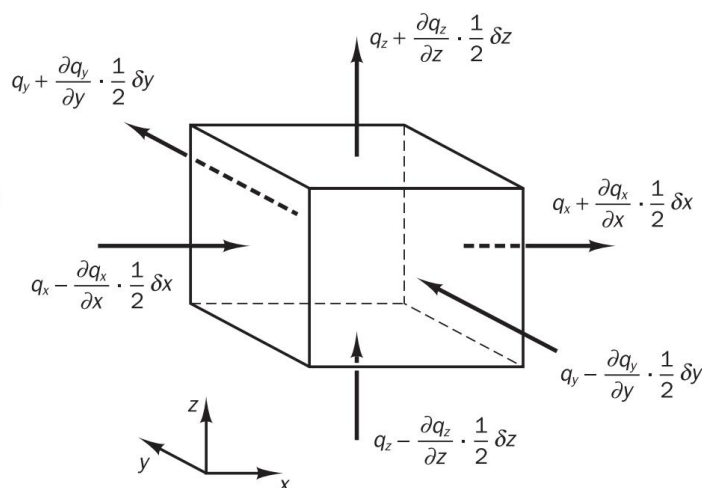


图 1.2 针对热传导问题所建立的微元体

于是，借助微元面内均匀分布假设，可得 X 方向上净流入的能量为：

$$\left(q_x - \frac{\partial q_x}{\partial x} \frac{1}{2} \delta x \right) \delta y \delta z - \left(q_x + \frac{\partial q_x}{\partial x} \frac{1}{2} \delta x \right) \delta y \delta z = -\frac{\partial q_x}{\partial x} \delta x \delta y \delta z \quad [1.3]$$

Y 方向和 Z 方向上净流入的能量分别为：

$$\left(q_y - \frac{\partial q_y}{\partial y} \frac{1}{2} \delta y \right) \delta x \delta z - \left(q_y + \frac{\partial q_y}{\partial y} \frac{1}{2} \delta y \right) \delta x \delta z = -\frac{\partial q_y}{\partial y} \delta x \delta y \delta z \quad [1.4]$$

$$\left(q_z - \frac{\partial q_z}{\partial z} \frac{1}{2} \delta z \right) \delta x \delta y - \left(q_z + \frac{\partial q_z}{\partial z} \frac{1}{2} \delta z \right) \delta x \delta y = -\frac{\partial q_z}{\partial z} \delta x \delta y \delta z \quad [1.5]$$

于是，**【通过微元面交换的能量】**为：

$$-\frac{\partial q_x}{\partial x} \delta x \delta y \delta z - \frac{\partial q_y}{\partial y} \delta x \delta y \delta z - \frac{\partial q_z}{\partial z} \delta x \delta y \delta z = -(\nabla \cdot \bar{q}) \delta x \delta y \delta z \quad [1.6]$$

进一步，傅立叶导热定律告诉我们 $\bar{q} = -k\nabla T$ ，将傅立叶导热定律代入式[1.6]可得【通过微元面交换的能量】为：

$$-(\nabla \cdot \bar{q}) \delta x \delta y \delta z = [\nabla \cdot (k\nabla T)] \delta x \delta y \delta z \quad [1.7]$$

【微元体自身产生的能量】为：

$$\rho Q \delta x \delta y \delta z \quad [1.8]$$

【微元体的能量变化】为：

$$\frac{\partial(\rho c T)}{\partial t} \delta x \delta y \delta z \quad [1.9]$$

联立式[1.7]~式[1.9]，可得：

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} \delta x \delta y \delta z = [\nabla \cdot (k\nabla T)] \delta x \delta y \delta z + \rho Q \delta x \delta y \delta z \quad [1.10]$$

进一步可写为：

$$\frac{\partial(\rho c T)}{\partial t} = \nabla \cdot (k\nabla T) + \rho Q \quad [1.11]$$

式中， ρ 为密度； c 为比热容，物理含义为单位质量的材料，温度升高或降低 1 K，需要吸收或释放的热量； T 为温度； k 为导热系数，物理含义为相距为 1 m 的两个点，两者温差为 1 K，单位时间沿两点连线所传递的热量； Q 为体热源，物理含义为单位时间单位质量内物体自身产生或吸收的热量。式[1.11]就是我们用来描述热传导现象的控制方程，即所谓的热传导控制方程。通过热传导控制方程的推导，我们发现我们假设的微元体长、宽、高 δx 、 δy 、 δz 被消除了，得到的控制方程完全是从微分角度来描述事物的，因此，该控制方程应当适用于材料内部所有的点。

当我们认为物性参数是常数时，式[1.11]可改写为：

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = k\nabla \cdot (\nabla T) + \rho Q = k\Delta T + \rho Q \quad [1.12]$$

通常，控制方程只能用来描述物体内部的变化规律，因为我们研究的微元体是材料内部的一部分。所以，在描述实际物理现象时，我们还需要所谓的边界条件，比如我们把那杯热水放进冰箱，还是放进烤箱，区别就在于边界条件不一样。对于温度边界条件而言，一般分为三类：

- 第一类边界条件（定温边界条件）

此时直接指定边界面上的温度值，数学形式为：

$$T = \bar{T} \quad [1.13]$$

- 第二类边界条件（定热流边界条件）

此时指定了边界面上的热流密度，数学形式为：

$$k\nabla T \cdot \bar{n} = k \frac{\partial T}{\partial x} n_x + k \frac{\partial T}{\partial y} n_y + k \frac{\partial T}{\partial z} n_z = q \quad [1.14]$$

式中， \bar{n} 为边界面的外法向单位向量。

- 第三类边界条件（对流换热边界条件）

此时指定了外界介质的温度 T_a 和对流换热系数 h ，数学形式为：

$$k\nabla T \cdot \bar{n} = k \frac{\partial T}{\partial x} n_x + k \frac{\partial T}{\partial y} n_y + k \frac{\partial T}{\partial z} n_z = h(T_a - T) \quad [1.15]$$

至此，我们已经构建出了用于描述热传导规律的热传导控制方程，意味着如果在实际过程中我们碰到一个传热的问题，该问题只涉及到热传导，或者热传导占其传热作用的主要部分，我们就可以用热传导控制方程加上三类温度边界条件去处理它了。但是，如果该问题还涉及到**热辐射**或**热对流**，且热辐射或热对流起到主要影响，那么使用热传导控制方程就不合适了。当然，我们也会有对应的控制方程和边界条件来处理热辐射与热对流。

参考资料：

[1] 热传导控制方程推导.pptx

[2] 图片来源于《An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method》.

二、流动控制方程

对于流动过程而言，其控制方程有两类，一是**质量守恒方程**，二是**动量守恒方程（牛顿第二定律）**。当我们构建完流动控制方程以后，往往发现方程组无法封闭，即方程的个数小于未知量的个数，这时我们往往需要加入所谓的**本构模型**，其用于将控制方程封闭。通常所说的本构模型，指的是描述材料力与变形关系的数学表达式，比如水的流动和糖浆的流动很明显是不一样的，但它们应该都可以采用流动控制方程来描述，两者的差别就体现在水和糖浆的本构模型不同。大多数时候，我们认为本构模型就是流动控制方程的一部分。通过后面的学习，读者会对本构模型与控制方程之间的关系有更为深入的认识。

2.1 质量守恒方程

质量守恒定律可表示为：

【单位时间内微元体中流体质量的增加】 = 【同一时间间隔内流入该微元体的净质量】

图 2.1.1 为针对质量守恒定律所建立的微元体，其中，我们设微元体中心处在三个正方向上的速度分量分别为 u 、 v 、 w ，微元体中心处在三个正方向上的质量流密度分量分别为 ρu 、 ρv 、 ρw （质量流密度为矢量，其某个方向上的分量意味着单位时间通过垂直于该方向的单位面积传递了多少质量的流体）。进而，可以得到 6 个微元面中心与其垂直的质量流密度分量（图 2.1.1）。

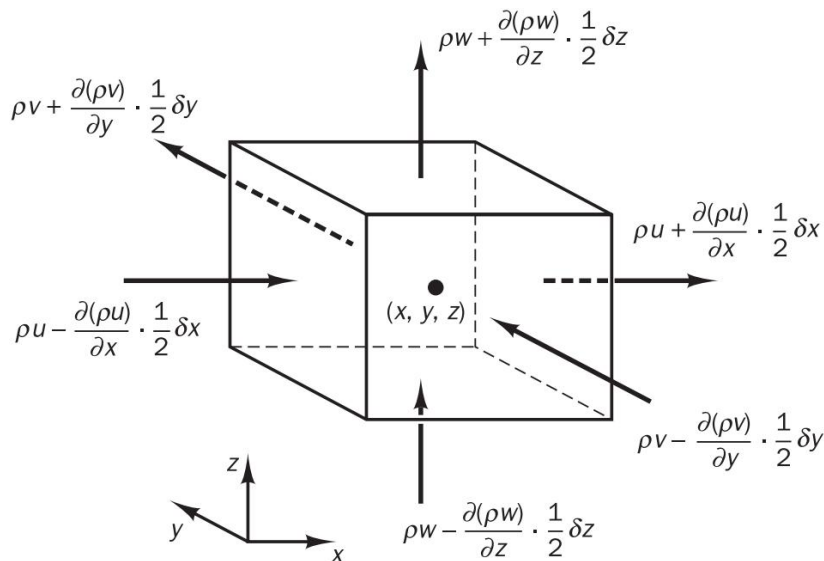


图 2.1.1 针对质量守恒定律所建立的微元体

于是，借助微元面内均匀分布假设，可得单位时间通过右侧面**流出**微元体的

流体质量为：

$$\left[\rho u + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \cdot \frac{1}{2} \delta x \right] \delta y \delta z \quad [2.1.1]$$

单位时间通过左侧面**流进**微元体的流体质量为：

$$\left[\rho u - \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \cdot \frac{1}{2} \delta x \right] \delta y \delta z \quad [2.1.2]$$

由式[2.1.1]和式[2.1.2]可得单位时间通过左、右侧面流进微元体的**净质量**为：

$$\left[\rho u - \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \cdot \frac{1}{2} \delta x \right] \delta y \delta z - \left[\rho u + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \cdot \frac{1}{2} \delta x \right] \delta y \delta z = -\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \delta x \delta y \delta z \quad [2.1.3]$$

易得单位时间通过前、后以及上、下侧面流进微元体的净质量分别为：

$$-\frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \delta x \delta y \delta z \quad [2.1.4]$$

$$-\frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \delta x \delta y \delta z \quad [2.1.5]$$

于是，【同一时间间隔内流入该微元体的净质量】为：

$$-\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \delta x \delta y \delta z - \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \delta x \delta y \delta z - \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \delta x \delta y \delta z = -[\nabla \cdot (\rho \bar{U})] \delta x \delta y \delta z \quad [2.1.6]$$

而，【单位时间内微元体中流体质量的增加】为：

$$\frac{\partial(\rho \delta x \delta y \delta z)}{\partial t} = \frac{\partial \rho}{\partial t} \delta x \delta y \delta z \quad [2.1.7]$$

联立式[2.1.6]和式[2.1.7]可得：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \delta x \delta y \delta z = -[\nabla \cdot (\rho \bar{U})] \delta x \delta y \delta z \quad [2.1.8]$$

可改写为：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{U}) = 0 \quad [2.1.9]$$

其标量形式为：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad [2.1.10]$$

式[2.1.9]或式[2.1.10]就是**质量守恒方程**(mass conservation equation)或**连续性方程**(continuity equation)。

对于不可压缩流体，流体密度为常数，连续性方程可简化为：

$$\nabla \cdot \bar{U} = 0 \quad [2.1.11]$$

通过推导质量守恒方程，想必读者对“0.5 散度”中**散度**的物理含义有了更

为深入的认识。

参考资料:

- [1] 连续性方程推导.pptx
- [2] 陶文铨. 数值传热学(第2版). p1-p2.
- [3] 图片来源于《An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method》.

2.2 动量守恒方程

首先需要理解物质导数 $\frac{D(\quad)}{Dt}$ 这个概念。物质导数就是数学中的全导数，借助泰勒展开，任何的流场数据都可以用物质导数来表示其在欧拉框架下随时间的变化率^[1]。我们先从数学层面上推导物质导数 $\frac{D(\quad)}{Dt}$ 的计算式，后面再谈物质导数的物理含义。我们取物理量 $T(t, x, y, z)$ 为时间 (t) 和空间 (x, y, z) 的函数，我们将

$T_2(t_2, x_2, y_2, z_2)$ 在 $T_1(t_1, x_1, y_1, z_1)$ 处进行泰勒展开:

$$T_2 = T_1 + \left(\frac{\partial T}{\partial t}\right)_1 (t_2 - t_1) + \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_1 (x_2 - x_1) + \left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)_1 (y_2 - y_1) + \left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)_1 (z_2 - z_1) + \text{高阶项} \quad [2.2.1]$$

将式[2.2.1]两端减去 T_1 ，并除以 $t_2 - t_1$ ，同时忽略高阶项，可得:

$$\frac{T_2 - T_1}{t_2 - t_1} = \left(\frac{\partial T}{\partial t}\right)_1 + \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_1 \frac{x_2 - x_1}{t_2 - t_1} + \left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)_1 \frac{y_2 - y_1}{t_2 - t_1} + \left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)_1 \frac{z_2 - z_1}{t_2 - t_1} \quad [2.2.2]$$

如果我们认为 T_1 和 T_2 表示流体中同一质点在不同时刻的状态，当我们取极限 $t_2 \rightarrow t_1$ 时，可得:

$$u_1 = \lim_{t_2 \rightarrow t_1} \frac{x_2 - x_1}{t_2 - t_1} \quad [2.2.3]$$

$$v_1 = \lim_{t_2 \rightarrow t_1} \frac{y_2 - y_1}{t_2 - t_1} \quad [2.2.4]$$

$$w_1 = \lim_{t_2 \rightarrow t_1} \frac{z_2 - z_1}{t_2 - t_1} \quad [2.2.5]$$

式中， u_1 、 v_1 、 w_1 分别为 t_1 时刻该质点在三个正方向上的速度分量。

将式[2.2.3]~式[2.2.5]代入式[2.2.2]，可得：

$$\frac{DT_1}{Dt_1} = \lim_{t_2 \rightarrow t_1} \frac{T_2 - T_1}{t_2 - t_1} = \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right)_1 + \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_1 u_1 + \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_1 v_1 + \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_1 w_1 \quad [2.2.6]$$

可改写为：

$$\frac{DT}{Dt} = \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial T}{\partial x} u + \frac{\partial T}{\partial y} v + \frac{\partial T}{\partial z} w = \frac{\partial T}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla T \quad [2.2.7]$$

式[2.2.7]就是流场下物理量 T 的**物质导数**，即物质导数的数学计算式为：

$$\frac{D(\quad)}{Dt} = \frac{\partial(\quad)}{\partial t} + u \frac{\partial(\quad)}{\partial x} + v \frac{\partial(\quad)}{\partial y} + w \frac{\partial(\quad)}{\partial z} = \frac{\partial(\quad)}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla(\quad) \quad [2.2.8]$$

式中，右端的第一项为**局部导数**（**当地导数**），第二项为**对流导数**。

物质导数又称**随体导数**，其物理意义为：它是运动的流体微团的物理量随时间的变化率，它等于该物理量由当地时间变化所引起的变化率与由流体对流引起的变化率之和。如果物理量 T 代表流体质点的温度，那么物质导数 $\frac{DT}{Dt}$ 描述的是我们跟随流体质点的运动来测量其温度的变化（这属于拉格朗日方法的思想），而当地导数 $\frac{\partial T}{\partial t}$ 描述的是我们作为观察者固定在流场中的某一位置来测量温度的变化。可见，当流场流速为 0 时，物质导数与当地导数的计算结果是一致的，但当流场流速不为 0 时，物质导数与当地导数的计算结果是不一致的。因此，当我们在欧拉框架下描述一个流体质点或微元体时，如果我们需要计算物理量随时间的变化率，应该使用物质导数。这里需要说明的是，只有当我们在欧拉框架下描述流体时（即数值计算方法为**欧拉方法**，“六、有限差分法”内容中会做一定介绍），才会使用物质导数；当我们使用**拉格朗日方法**描述流体时，不使用所谓的物质导数和当地导数，而直接跟踪颗粒并测量其温度变化就好了，类似于计算的是 $\frac{dT}{dt}$ ，即认为颗粒的温度只与时间相关。

接下来需要说明如何描述质点的**受力状态**。首先，我们采用一个**三维无穷小**的微元体来代替这个质点，注意这里的微元体尺寸是无穷小，与上面我们建立的微元体 $\delta x \delta y \delta z$ 是不一样的（之所以要不一样，接下来会进行解释）。这里我们先直接给出**三维无穷小微元体受到的应力张量**可以表示为^[2, 3, 4]：

$$\tau = \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix} \quad [2.2.9]$$

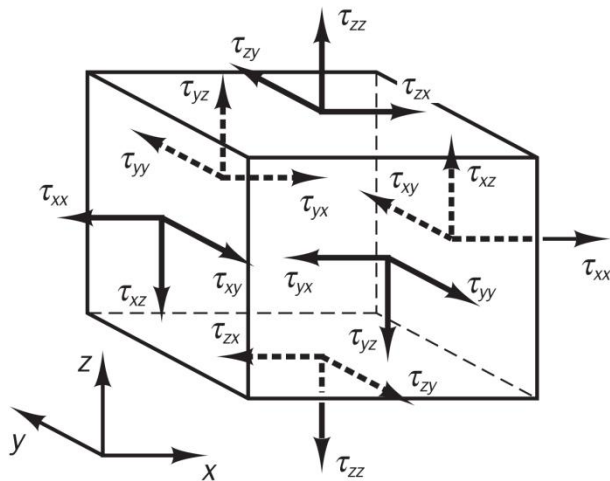


图 2.2.1 三维应力状态示意图 1

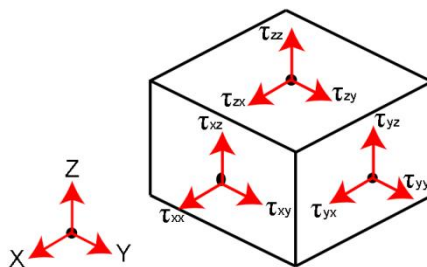


图 2.2.2 三维应力状态示意图 2

一个微元面的应力可以用 3 个分量来表示（针对微元面中心而言），按道理来说，如果想完整地描述一个微元体的应力状态应该需要 18 个分量（图 2.2.1），但式[2.2.9]中的二阶应力张量只有 9 个分量。这是因为这个微元体代表的是一个质点，其尺寸为无穷小，相对的两个面的受力可视为是作用力与反作用力，因此，18 个分量里面有 9 个是相同的。可见，一个点的应力状态可以由 3 个互相垂直平面的 9 个分力来描述（图 2.2.2）。需要说明的是，应力张量的各分量方向之所以按图 2.2.2 所示方向指定，其规则如下：

- 1) 每个应力分量均有两个下标。第一个下标表示应力作用面法线的方向，第二个下标表示该应力的作用方向。有时也可省略两个相同下标中的一个。
- 2) 如果某一截面上的外法线方向是沿着坐标轴的正向，则作用在这个截面上的应力分量就以沿着坐标轴正方向为正，沿坐标轴负方向为负。
- 3) 如果某一截面上的外法线方向是沿着坐标轴的负向，则作用在这个截面上的应力分量就以沿着坐标轴负方向为正，沿坐标轴正方向为负。

（如果不理解规则 2 和 3，可以想象用一假想截面把一受拉伸的杆截开，截开后的左侧面和右侧面的应力方向正好相反，这两个侧面相当于该点应力张量的两个相对的作用面）

现在以一微元体 $\delta x \delta y \delta z$ （图 2.2.3）为分析对象，该微元体的 6 个面可以认为是两个对角顶点各自取 3 个受力面包围而成，且我们认为两对角顶点的应力分量

均为线性变化（相对于微元体中心而言）。

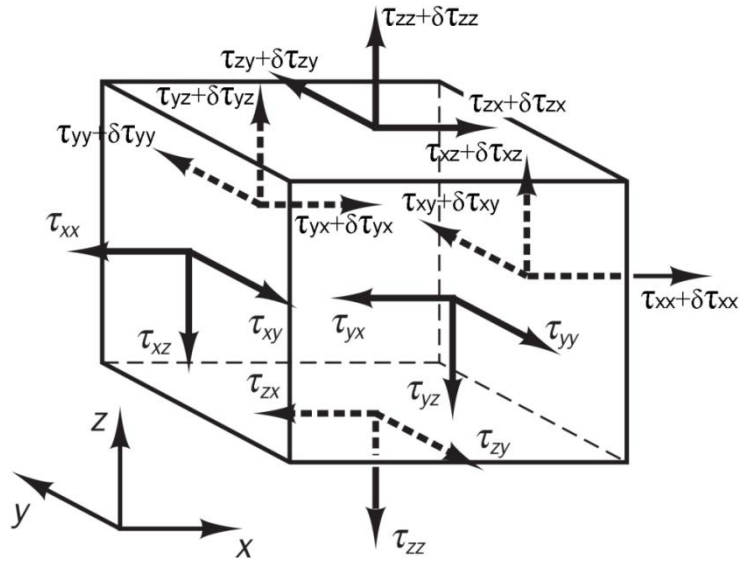


图 2.2.3 针对动量守恒定律所建立的微元体

微元体在 X 方向各个面受到的表面力为（图 2.2.4）：

$$F_x = \left(-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right) \delta x \delta y \delta z \quad [2.2.10]$$

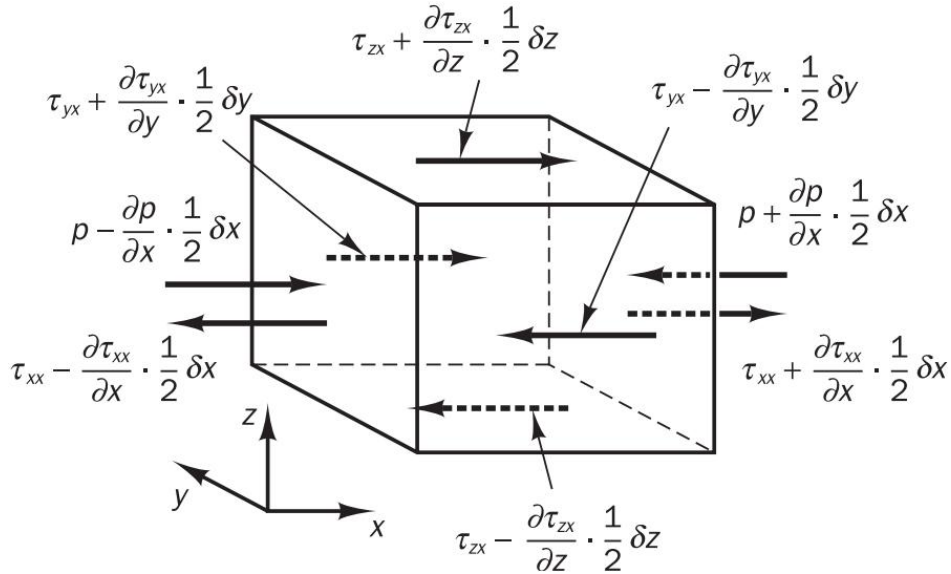


图 2.2.4 X 方向各个面受到的表面力

同理，在 Y 方向和 Z 方向各个面受到的表面力为：

$$F_y = \left(-\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} \right) \delta x \delta y \delta z \quad [2.2.11]$$

$$F_z = \left(-\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right) \delta x \delta y \delta z \quad [2.2.12]$$

式[2.2.10]~式[2.2.12]的推导过程可以参照热传导控制方程与质量守恒方程

的推导，并不会更复杂，只是处理的项多了一些。需要说明的是，式[2.2.10]~式[2.2.12]中把压力 p 的作用被单独列出来了，所以此时的张量 τ_{ij} 代表的是**剪切应力状态**（之所以将压力单独列出来，是因为压力只会影响流体的体积变化）。对微元体分别在三个坐标方向上应用**牛顿第二定律**，其在流体流动中的表现形式为：

【微元体中流体动量的增加率】 = 【作用在微元体上各种力之和】

X 方向的动量方程为：

$$\rho \delta x \delta y \delta z \frac{Du}{Dt} = \left(-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right) \delta x \delta y \delta z \quad [2.2.12]$$

即可得三个方向上的动量方程为：

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla u \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \quad [2.2.13]$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla v \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} \quad [2.2.14]$$

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = \rho \left(\frac{\partial w}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla w \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \quad [2.2.15]$$

动量守恒方程(momentum conservation equation)的矢量形式为：

$$\rho \left(\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla \bar{U} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau \quad [2.2.16]$$

考虑**体积力**的动量方程为：

$$\rho \left(\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla \bar{U} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + \bar{F} \quad [2.2.17]$$

式中， \bar{F} 代表单位体积受到的体积力， $\bar{F} = \rho \bar{g}$ 即代表重力的作用。

至此，我们已经构建出描述流体流动的**流动控制方程**（这就是大名鼎鼎的**Navier-Stokes 方程**，简称**N-S 方程**）：

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \\ \rho \left(\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla \bar{U} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + \bar{F} \end{cases} \quad [2.2.18]$$

式[2.1.18]一共有 4 个方程，我们需要求解 \bar{U} 和 p （共 4 个变量），但由于式[2.2.17]中的剪切应力张量 τ 是未知的，所以我们需要建立 τ 和 \bar{U} 的关系（即所谓的**本构关系**或**本构模型**），以将问题封闭。

接下来需要了解一个新的变量：**变形速率**（又称为**应变率**），变形速率和剪切应力类似，都是二阶张量：

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \quad [2.2.19]$$

对于各向同性流体，变形速率张量的 9 个分量中有 6 个是独立的：

$$\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yx}, \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{zx}, \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zy} \quad [2.2.20]$$

将变形速率张量写成速度的关系为：

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \end{bmatrix} = \frac{1}{2} (\nabla \bar{\mathbf{U}} + \nabla \bar{\mathbf{U}}^T) \quad [2.2.21]$$

这里需要对变形速率张量 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 的由来进行解释。物体中任一点的运动可以由三个方面组成：**平动**、**变形**（形状变化【角变形】与体积变化【线变形】）和**转动**，根据**亥姆霍兹速度分解定理**^[5]可知，某一点 M 的速度 $\bar{\mathbf{U}}_M$ 可由参考点 M_0 的速度 $\bar{\mathbf{U}}_{M_0}$ 、 M_0 到 M 的位移向量 $\bar{\boldsymbol{\delta}}_r$ 、**变形速率张量** $\boldsymbol{\varepsilon}$ 以及**旋转角速度** $\bar{\boldsymbol{\omega}}$ 决定：

$$\bar{\mathbf{U}}_M = \bar{\mathbf{U}}_{M_0} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \bar{\boldsymbol{\delta}}_r + \bar{\boldsymbol{\omega}} \times \bar{\boldsymbol{\delta}}_r \quad [2.2.22]$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \end{bmatrix} \quad [2.2.23]$$

$$\bar{\boldsymbol{\omega}} = \frac{1}{2} \nabla \times \bar{\mathbf{U}} = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \bar{\mathbf{i}} & \bar{\mathbf{j}} & \bar{\mathbf{k}} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ u & v & w \end{vmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial z} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right) \end{bmatrix} \quad [2.2.24]$$

式中，**变形速率张量** $\boldsymbol{\varepsilon}$ 为**对称二阶张量**。式[2.2.22]右端的第一项代表平动，第二项代表变形（角变形+线变形），第三项代表转动。

对于可压缩牛顿流体，其剪切应力张量 $\boldsymbol{\tau}$ 与变形速率张量 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 的关系为：

$$\tau = 2\mu\varepsilon - \lambda(\nabla \cdot \bar{U})\mathbf{I} = \mu(\nabla\bar{U} + \nabla\bar{U}^T) - \lambda(\nabla \cdot \bar{U})\mathbf{I} \quad [2.2.25]$$

$$\tau = \begin{bmatrix} 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu\nabla \cdot \bar{U} & \mu\left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}\right) & \mu\left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z}\right) \\ \mu\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) & 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3}\mu\nabla \cdot \bar{U} & \mu\left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z}\right) \\ \mu\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}\right) & \mu\left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}\right) & 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{2}{3}\mu\nabla \cdot \bar{U} \end{bmatrix} \quad [2.2.26]$$

其中， μ 为动力黏度；Stokes 认为 $\lambda = \frac{2}{3}\mu$ 。式[2.2.25]中只考虑了变形速率张量 ε ，而未考虑旋转角速度 $\bar{\omega}$ 的原因是剪切应力只能使得流体微元发生变形，而无法使其发生旋转。

这里对式[2.2.25]的由来进行说明。式[2.2.17]中的“ $-\nabla p$ ”代表压力对微元体体积变化（线变形）的影响，“ $\nabla \cdot \tau$ ”代表剪切应力对微元体形状变化（角变形）的影响。如上所述，变形速率张量 ε 包含了微元体的形状变化与体积变化，因此，建立剪切应力张量 τ 与变形速率张量 ε 的关系时需要将微元体的体积变化剔除出去，于是变形速率张量 ε 可拆分为：

$$\varepsilon = \varepsilon' + \varepsilon_m \quad [2.2.27]$$

$$\varepsilon' = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{1}{3}\nabla \cdot \bar{U} & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}\right) & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z}\right) \\ \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) & \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{1}{3}\nabla \cdot \bar{U} & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z}\right) \\ \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}\right) & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}\right) & \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{1}{3}\nabla \cdot \bar{U} \end{bmatrix} \quad [2.2.28]$$

$$\varepsilon_m = \begin{bmatrix} \frac{1}{3}\nabla \cdot \bar{U} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3}\nabla \cdot \bar{U} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3}\nabla \cdot \bar{U} \end{bmatrix} = \frac{1}{3}(\nabla \cdot \bar{U})\mathbf{I} \quad [2.2.29]$$

角变形速率张量 ε' 代表微元体的形状变化，线变形速率张量 ε_m 代表微元体的体积变化。事实上，可以将剪切应力张量理解为“八、应力与应变”中的**应力偏张量**，将压力理解为“八、应力与应变”中的**应力球张量**，将角变形速率张量 ε' 理解为“八、应力与应变”中的**应变偏张量**，将线变形速率张量 ε_m 理解为“八、应力与应变”中的**应变球张量**。牛顿流体本构关系的本质是剪切应力与形状变化

成线性关系，动力黏度 μ 为斜率：

$$\tau = 2\mu\varepsilon' = 2\mu(\varepsilon - \varepsilon_m) = 2\mu\varepsilon - 2\mu \cdot \frac{1}{3}(\nabla \cdot \bar{U})\mathbf{I} = 2\mu\varepsilon - \lambda(\nabla \cdot \bar{U})\mathbf{I} \quad [2.2.30]$$

(注：可认为式[2.2.30]中的系数“2”是为了消除变形速率张量 ε 中的系数“1/2”。)

通常，我们希望建立剪切应力张量 τ 与剪切速率张量 $\dot{\gamma}$ 的关系，于是可以将式[2.2.25]改写为：

$$\tau = 2\mu\varepsilon - \lambda(\nabla \cdot \bar{U})\mathbf{I} = \mu\dot{\gamma} - \lambda(\nabla \cdot \bar{U})\mathbf{I} = \mu(\nabla\bar{U} + \nabla\bar{U}^T) - \lambda(\nabla \cdot \bar{U})\mathbf{I} \quad [2.2.31]$$

需要说明的是， $\dot{\gamma} = 2\varepsilon$ 是人为地处理，只是为了让本构关系显得更为直观。

将式[2.2.31]代入式[2.2.17]，可得可压缩牛顿流体的动量方程为：

$$\rho\left(\frac{\partial\bar{U}}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla\bar{U}\right) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\mu(\nabla\bar{U} + \nabla\bar{U}^T) - \frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot \bar{U})\mathbf{I}\right] + \bar{F} \quad [2.2.32]$$

对于不可压缩牛顿流体，其剪切应力张量 τ 与剪切速率张量 $\dot{\gamma}$ 的关系为：

$$\tau = \mu\dot{\gamma} = \mu(\nabla\bar{U} + \nabla\bar{U}^T) \quad [2.2.33]$$

(注：对于不可压缩流体， $\varepsilon = \varepsilon'$ 成立。)

将式[2.2.33]代入式[2.2.17]可得：

$$\rho\left(\frac{\partial\bar{U}}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla\bar{U}\right) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla\bar{U} + \nabla\bar{U}^T)] + \bar{F} \quad [2.2.34]$$

对于不可压缩流体而言， $\nabla \cdot (\nabla\bar{U}^T) = 0_{3 \times 1}$ ，因此，动量方程可写为：

$$\rho\left(\frac{\partial\bar{U}}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla\bar{U}\right) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu\nabla\bar{U}) + \bar{F} \quad [2.2.35]$$

$\nabla \cdot (\nabla\bar{U}^T) = 0_{3 \times 1}$ 的推导过程为：

$$\nabla\bar{U} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial w}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial w}{\partial y} \\ \frac{\partial u}{\partial z} & \frac{\partial v}{\partial z} & \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix} \quad [2.2.36]$$

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\nabla \bar{\mathbf{U}}^T) &= \nabla \cdot \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial w}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial w}{\partial y} \\ \frac{\partial u}{\partial z} & \frac{\partial v}{\partial z} & \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial u}{\partial z} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial z} \\ \frac{\partial w}{\partial x} & \frac{\partial w}{\partial y} & \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix}^T \\ &= \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} (\nabla \cdot \bar{\mathbf{U}}) \\ \frac{\partial}{\partial y} (\nabla \cdot \bar{\mathbf{U}}) \\ \frac{\partial}{\partial z} (\nabla \cdot \bar{\mathbf{U}}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \mathbf{0}_{3 \times 1} \end{aligned} \quad [2.2.37]$$

至此，我们对已构建的**流动控制方程**进行归纳：

$$\text{适用于所有流体} \quad \begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \\ \rho \left(\frac{\partial \bar{\mathbf{U}}}{\partial t} + \bar{\mathbf{U}} \cdot \nabla \bar{\mathbf{U}} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \bar{\mathbf{F}} \end{cases} \quad [2.2.38]$$

$$\text{适用于可压缩牛顿流体} \quad \begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \\ \rho \left(\frac{\partial \bar{\mathbf{U}}}{\partial t} + \bar{\mathbf{U}} \cdot \nabla \bar{\mathbf{U}} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\mu (\nabla \bar{\mathbf{U}} + \nabla \bar{\mathbf{U}}^T) - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \bar{\mathbf{U}}) \mathbf{I} \right] + \bar{\mathbf{F}} \end{cases} \quad [2.2.39]$$

$$\text{适用于不可压缩牛顿流体} \quad \begin{cases} \nabla \cdot \bar{\mathbf{U}} = 0 \\ \rho \left(\frac{\partial \bar{\mathbf{U}}}{\partial t} + \bar{\mathbf{U}} \cdot \nabla \bar{\mathbf{U}} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu \nabla \bar{\mathbf{U}}) + \bar{\mathbf{F}} \end{cases} \quad [2.2.40]$$

细心的读者应该可以发现，我们少列了两类流体：**可压缩非牛顿流体**、**不可压缩非牛顿流体**。讨论牛顿流体（如水）与非牛顿流体（如糖浆、高分子溶液）是一个很大的话题，这里不做深入介绍，感兴趣的读者可以查阅非牛顿流体相关的书籍。当然，后面我们有专门的内容（“**四、非牛顿流体本构模型**”、“**五、唯象本构模型**”）对非牛顿流体的本构模型进行介绍。

与处理实际热传导问题时需要温度边界条件一样，在处理实际流动问题时，我们也需要指定**速度边界条件**、**压力边界条件**等。对于速度边界条件，通常会设置**定速边界条件**（即指定流速，通常用于**进口**）、**壁面边界条件**（即认为贴在壁面的那一层流体的速度与壁面速度一致，通常用于**壁面**）、**对称边界条件**（即认为在边界法向方向上的速度梯度分量为0，通常用于**出口**和**对称面**）等边界条件。各个商用化软件以及开源代码中的边界条件种类繁多，具体使用时读者还需具体把握。

最后，粗略地探讨几个关于剪切应力张量（应力张量）与变形速率张量（应变速率张量）的对称与非对称问题：

1) 剪切应力张量（应力张量）、变形速率张量（应变速率张量）、本构模型之间的物理逻辑是什么？

通常的物理逻辑是我们首先采用变形速率张量（应变速率张量）或其它形式来描述变形，再提出所谓的本构模型（即应力-应变关系），接着将变形速率张量与本构模型联立起来求得剪切应力张量（应力张量）。因此，可以认为变形速率张量（应变速率张量）或其它形式以及本构模型是条件，剪切应力张量（应力张量）是结果。

2) 变形速率张量一定是对称的吗？各向同性流体的变形一定需要采用变形速率张量来描述吗？

变形速率张量指的是式[2.2.21]，所以变形速率张量一定是对称的。各向同性流体的变形通常是采用变形速率张量来描述的，但是各向同性流体的变形并不是一定需要采用变形速率张量来描述。各向同性流体的变形可以采用柯西应变张量来描述，采用柯西应变张量描述时，本质上是求解变形速率与应力的积分方程，进而可以直接求得变形与应力。

3) 各向同性流体的剪切应力张量一定是对称的吗？

各向同性流体的剪切应力张量不一定是对称的。当我们采用变形速率张量来描述流体变形时，如果把流体视为牛顿流体或广义牛顿流体（即认为应力-应变速率关系是线性的），可以直接给出剪切应力与剪切速率的关系式，得到的剪切应力张量是对称的。当我们采用变形速率张量来描述流体变形时，如果把流体视为黏弹性流体（即认为应力-应变速率关系是非线性的），进而需要求解带有剪切应力张量的随体导数以及变形速率张量的偏微分方程来得到剪切应力张量（采用随体导数可以计算变形量，进而描述弹性），此时的剪切应力张量就并不一定是对称的。当我们采用柯西应变张量来描述流体变形时，如果应力-应变速率关系是非线性的，求得的应力张量也不一定是对称的。

4) 各向异性流体的变形可以使用变形速率张量来描述吗？

各向异性流体（如液晶、短纤维增强复合材料等）的应力-应变关系是十分复杂的，其复杂性体现在各个区域的微观构象在流动过程中是不断变化的，而构象又对应力起到重要影响，所以宏观的各向异性流体的应力-应变计算本质上是一个多尺度问题。各向异性流体的变形通常不采用变形速率张量来描述，而采用柯西应变张量来描述流体变形，并制定体现各向异性的模量张量（本质上模量张量是比应变张量更高一级的张量），进而求得的变形与应力，此时的应力张量不一定是对称的。

综上所述，处理各向同性流体和各向异性流体的应力-应变关系的方法可分为

(图 2.2.5) :

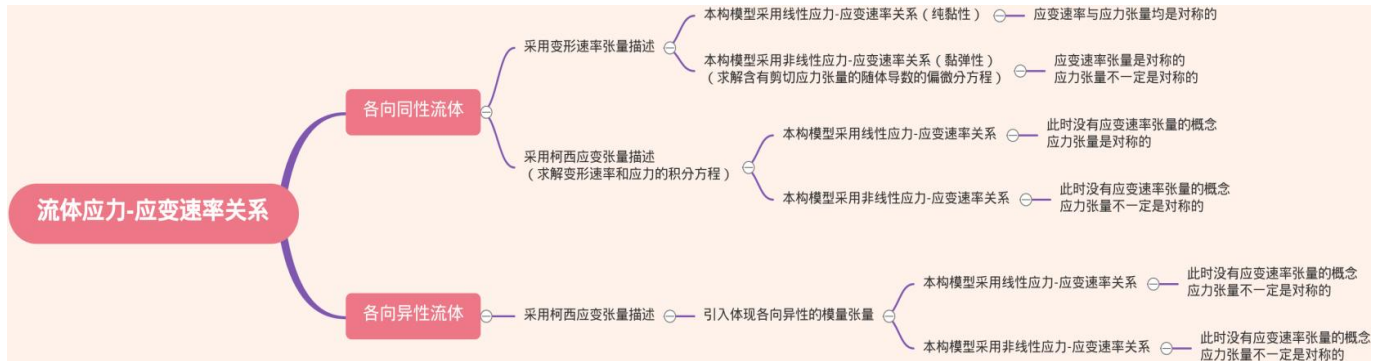


图 2.2.5 流体应力-应变速率关系

参考资料:

- [1] <https://zhuanlan.zhihu.com/p/146396629>.
- [2] 李东岳. 无痛苦 N-S 方程笔记. p22-p28.
- [3] 陶文铨. 数值传热学(第 2 版). p2-p4.
- [4] Versteeg H K. An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method. p14-p24.
- [5] 流体流动特性.pdf
- [6] 图片来源于《An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method》.

三、热对流控制方程

热对流控制方程的推导可以在热传导控制方程的基础上进行。从物理层面上来看，**热对流控制方程**相对于热传导控制方程的主要区别是：热对流控制方程考虑的是**流动情形**下的能量传递，相比于纯扩散导热，热对流控制方程需要考虑**物质导数**（随体导数）、**黏性耗散**、**体膨胀做功**。

对微元体应用**能量守恒定律**可得：

【微元体内热力学能的增加率】 =
【进入微元体的净热流量】 + 【微元体自身产生或吸收的热量】 + 【体积力对微元体做的功（体积膨胀或收缩做功）】 + 【表面力对微元体做的功（黏性耗散）】

很明显，热对流控制方程和热传导控制方程都是基于能量守恒定律得到的。已推导的**热传导控制方程**为：

$$\frac{\partial(\rho c T)}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) + \rho Q \quad [3.1]$$

经过对流动控制方程的推导，我们知道当在欧拉框架下描述一个流体质点时，如果我们需要计算物理量随时间的变化率，应该使用**物质导数** $\frac{DT}{Dt}$ ，而不是**当地导数** $\frac{\partial T}{\partial t}$ 。于是，我们只需要将式[3.1]中的 $\frac{\partial T}{\partial t}$ 替换为 $\frac{DT}{Dt}$ 即可描述热量如何在流体内部流动和扩散：

$$\frac{D(\rho c T)}{Dt} = \frac{\partial(\rho c T)}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla(\rho c T) = \nabla \cdot (k \nabla T) + \rho Q \quad [3.2]$$

式[3.2]还不是完整的热对流控制方程，因为其只考虑了**【微元体内热力学能的增加率】**、**【进入微元体的净热流量】**以及**【微元体自身产生或吸收的热量】**。而**【体积力对微元体做的功（体积膨胀或收缩做功）】**可表示为：

$$-p \nabla \cdot \bar{U} \quad [3.3]$$

【表面力对微元体做的功（黏性耗散）】可表示为：

$$\Phi = \mu \left\{ 2 \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \right] + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)^2 \right\} - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \bar{U} \quad [3.4]$$

式[3.4]可改写为：

$$\Phi = \mu |\dot{\gamma}|^2 - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \bar{U} \quad [3.5]$$

式中， $|\dot{\gamma}|$ 为剪切速率，其计算可参考式[4.3]。

将式[3.2]~式[3.4]进行整合，即可得到**热对流控制方程**^[1,2]：

$$\frac{\partial(\rho c T)}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla(\rho c T) = -p \nabla \cdot \bar{U} + \nabla \cdot (k \nabla T) + \Phi + Q \quad [3.6]$$

通常， $-p \nabla \cdot \bar{U}$ 可以忽略，于是式[3.6]可写为：

$$\frac{\partial(\rho c T)}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla(\rho c T) = \nabla \cdot (k \nabla T) + \Phi + Q \quad [3.7]$$

式[3.7]中的五项从左至右分别被称为瞬态项、对流项、扩散项、耗散项、源项。当我们取物性参数为常数时，式[3.7]可改写为：

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c \bar{U} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (k \nabla T) + \Phi + Q \quad [3.8]$$

热对流控制方程描述的是流体内部热量的传递规律，因此，描述实际问题时，还需要引入**边界条件**。热对流控制方程所需的边界条件与热传导控制方程所需的边界条件是相同的，这里就不做赘述。另外，这里对热对流控制方程的应用做一点引申，因为热对流控制方程中考虑了流动和扩散对温度的影响，所以我们将热对流控制方程称为**对流-扩散控制方程**。实际生活中有很多对流-扩散问题，比如将红色墨汁倒入清水中，红色墨汁在水中的运动就是典型的对流-扩散问题（图 3.1）。

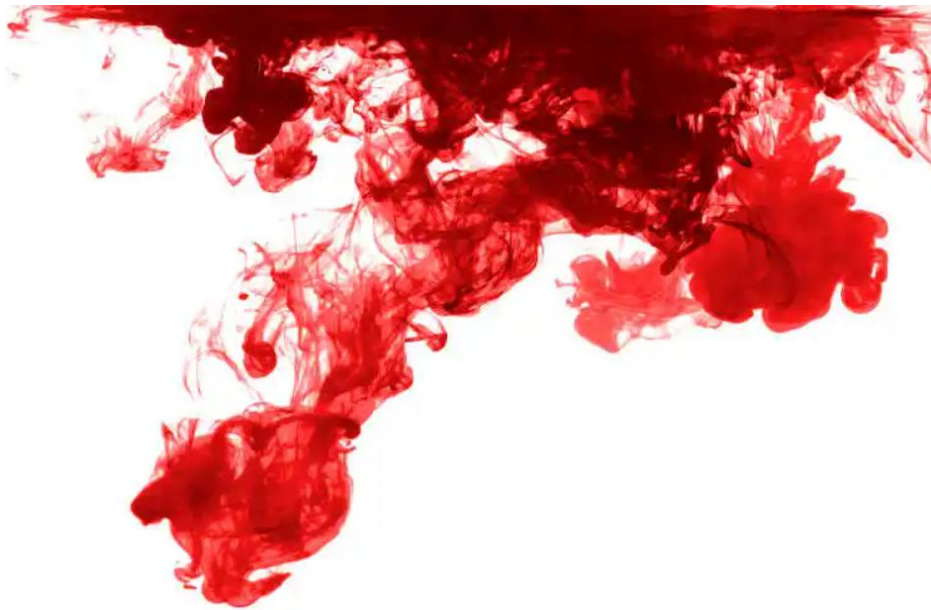


图 3.1 倒入清水的红色墨汁

于是，我们可以采用如下的**对流-扩散控制方程**来描述对流-扩散问题：

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla C = \nabla \cdot (k_c \nabla C) + Q_c \quad [3.9]$$

式中， C 为溶质浓度； k_c 为溶质扩散系数； Q_c 代表通过某种方式（如化学反应）产生或吸收的溶质。

至此，我们已经推导出传热和流动所涉及的三大控制方程：**热传导控制方程**、**流动控制方程**、**热对流控制方程**，这里对其进行归纳：

$$\text{热传导控制方程} \quad \frac{\partial(\rho c T)}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) + \rho Q \quad [3.10]$$

$$\text{适用于所有流体} \quad \begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \\ \rho \left(\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla \bar{U} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + \bar{F} \end{cases} \quad [3.11]$$

$$\text{流动控制方程} \quad \begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \\ \rho \left(\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla \bar{U} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\mu (\nabla \bar{U} + \nabla \bar{U}^T) - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \bar{U}) \mathbf{I} \right] + \bar{F} \end{cases} \quad [3.12]$$

$$\text{适用于不可压缩牛顿流体} \quad \begin{cases} \nabla \cdot \bar{U} = 0 \\ \rho \left(\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla \bar{U} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu \nabla \bar{U}) + \bar{F} \end{cases} \quad [3.13]$$

$$\text{热对流控制方程} \quad \frac{\partial(\rho c T)}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla(\rho c T) = \nabla \cdot (k \nabla T) + \Phi + Q \quad [3.14]$$

当我们处理**热传导问题**（如烧红的铁块温度如何下降）时，只需使用热传导控制方程（式[3.10]），此时只有一个未知量 T ，因此方程是封闭的。当我们处理**纯流动问题**（如往杯子里倒水）时，只需要使用流动控制方程（式[3.11]~式[3.13]中的一个），式[3.11]是无法直接使用的，必须引入本构模型；式[3.13]中的未知量有 4 个（ \bar{U}, p ），因此方程是封闭的，可以进行求解（这里的求解指的是**数值解**，而不是**解析解**，N-S 方程的解析解目前仍然是公认的世界难题）；式[3.12]中的未知量有 5 个（ \bar{U}, p, ρ ），而方程只有 4 个，因此方程是不封闭的。通常在计算可压缩流体的流动时，我们还需要引入一个**状态方程**（ $p = p(\rho, T)$ ，用于联系 p 和 ρ ），这样方程组才能封闭。对于理想气体而言，该状态方程就是我们熟知的**理想气体状态方程**：

$$p = \rho R T \quad [3.15]$$

如果该流动问题是等温流动问题，那么式[3.12]与式[3.15]就封闭了；如果该问题是非等温流动问题，那么就不是纯流动问题了，而应该是属于可压缩流体的热对流问题，此时应该将式[3.12]、式[3.15]与式[3.14]联立起来，方程才能封闭；如果研究的问题为不可压缩流体的热对流问题，只需将式[3.13]与式[3.14]联立起来就可以了。**表 3.1** 给出了不同问题所需要的控制方程。

表 3.1 不同问题所需的控制方程

| 问题 | 未知量 | 控制方程 |
|----------|----------------------|--|
| 热传导问题 | 1 个 (T) | 热传导控制方程 |
| 不可压缩流动问题 | 4 个 (\bar{U}, p) | 流动控制方程 |
| 可压缩流动问题 | 等温可压缩流动问题 | 5 个 (\bar{U}, p, ρ) 流动控制方程 状态方程 |
| | 不等温可压缩流动问题 | 6 个 (\bar{U}, p, ρ, T) 流动控制方程 状态方程 热对流控制方程 |
| 热对流问题 | 不可压缩热对流问题 | 5 个 (\bar{U}, p, T) 流动控制方程 热对流控制方程 |
| | 可压缩热对流问题 | 6 个 (\bar{U}, p, ρ, T) 流动控制方程 状态方程 热对流控制方程 |

(注：不等温可压缩流动问题与可压缩热对流问题其实是同一个问题，只是关注点不一样而已。)

从表 3.1 可知，当需要考虑流体可压缩性的时候，控制方程的数目是最多的，可见计算也是最复杂的。通常，当我们处理的问题中流体的流速不是很大时，我们往往将流体视为不可压缩的。另外，上面我们推导得到的各类控制方程似乎并不能描述一些特定领域的传热和流动问题，比如我们想研究**磁流体**在磁场作用下的流动、研究流体在**多孔介质**中的流动、研究**浮力**对流动的影响等。当我们想研究磁流体在磁场作用下的流动时，只需在流动控制方程右端添加一个**磁力作用项**即可；当我们想研究流体在多孔介质中的流动时，只需在流动控制方程右端添加一个**多孔介质阻力项**即可；当我们想研究浮力对流动的影响时，只需在流动控制方程右端添加一个**浮力项**即可。本质上，在控制方程中增/减项，其实就是在添加/删减物理影响因素。这里只是告诉读者，当你面对一个具体专业里的具体问题时，你可以通过在基本的控制方程中定义自己的控制方程，以达到描述特定问题的目的。至于如何自定义控制方程，得需要读者自己查阅相应领域的研究，当然也可以自己提。当面对一个实际问题时，最好的策略不是把什么影响因素都考虑进来，因为这样会造成控制方程过于复杂，甚至无法求解，而应该是把主要的影响因素提炼出来，做一定的简化与假设，从而得到可以被求解的控制方程。

参考资料：

- [1] 陶文铨. 数值传热学(第 2 版). p4-p5.
- [2] 热对流控制方程推导.ppt
- [3] 图片来源于网络.

四、流变学与非牛顿流体本构模型

英国科学家牛顿在 1687 年最先提出了流体的剪切应力和剪切应变速率成正比，后来将此称为**牛顿黏性定律**（式[4.1]，即式[2.2.31]），并将符合这一规律的流体称为**牛顿流体**，其中包括最常见的流体（水和空气），而将不符合这一规律的流体称为**非牛顿流体**。^[1]

$$\tau = \mu \dot{\gamma} \quad [4.1]$$

英国物理学家胡克于 1678 年首先提出：在小变形情况下，固体的变形与所受的外力成正比。这一弹性体变形与应力关系的基本规律，后来被称为**胡克定律**：

$$\tau = E\gamma \quad [4.2]$$

从力学的角度分析，通常认为**流体与固体**的主要差别在于，它们对外力的抵抗能力不同。固体有能力抵抗一定大小的拉力、压力和剪切力。当外力作用在固体上时，固体将产生一定程度的变形。固体静止时，可以有法向应力和切向应力。而流体处于静止时，不能承受切向应力，微小的剪切力将使流体产生连续不断的变形。只有当剪切力停止作用时，流体的变形方能停止。这种在外力作用下连续不断变形的宏观性质，通常被称为**流动性**。^[1]

非牛顿流体是指不满足牛顿黏性定律的流体，即其剪切应力与剪切应变速率之间不是线性关系的流体。非牛顿流体广泛存在于生活、生产和大自然之中，如石油、泥浆、牙膏、血液以及绝大多数聚合物等。非牛顿流体有许多奇妙的特性，如射流胀大、无管虹吸、剪切变稀、拔丝、湍流减阻等，其中有一个令人感兴趣的特性，就是部分非牛顿流体具有弹性，亦被称为**黏弹性流体**^[1]。当旋转杆插入黏弹性流体时，流体将沿杆向上爬升，液面呈凸形（图 4.1）。



图 4.1 黏弹性流体的爬杆效应（旋转金属棒，左边流体为牛顿流体，右边流体为黏弹性流体）

通常，我们可以从黏性、弹性和塑性三个方面对非牛顿流体进行区分（图 4.2）：剪切变稀流体的黏度随着剪切速率增加而降低（**假塑性流体**）；剪切增稠流体的黏度随着剪切速率增加而增加（**胀塑性流体**）；当所受的剪切应力超过临界剪切

应力后，才能发生流动行为，类似于发生塑性变形所需的屈服强度（**塑性流体**，又称**宾汉流体**或**黏塑性流体**）；宾汉流体又可根据其所受的剪切应力超过临界剪切应力后，表现出牛顿流体、假塑性流体或胀塑性流体特性，而进一步分为**宾汉塑性流体**、**屈服假塑性流体**或**屈服胀塑性流体**；黏弹性流体既具备黏性，也具备类似固体的弹性（**黏弹性流体**）；当应力达到一定值时，黏弹性流体才可发生变形，或物体在弹性和塑性变形阶段均具有黏性效应，则称这种流体为**黏弹塑性流体**。

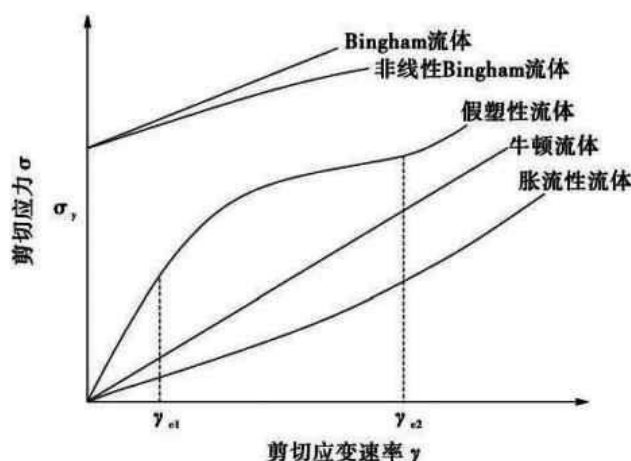


图 4.2 非牛顿流体的剪切应力-剪切应变速率曲线（这里并未展示黏弹性流体）

另外，还有两类非牛顿流体：**触变性流体**、**震凝性流体**（**反触变流体**）。触变性流体：剪切速率不变，黏度随时间减少，如以一定的速率刷油漆，流动阻力逐渐减小。触变性可以看成是系统在恒温下“凝胶—溶胶”之间的相互转换过程的表现。震凝性流体：剪切速率不变，黏度随时间增大。触变性流体与震凝性流体属于**依时性非牛顿流体**，而牛顿流体、假塑性流体、胀塑性流体及宾汉流体都属于**非依时性流体**。之所以会出现非依时性和依时性，可理解为，非依时性指的是变形速率改变后，流体内部结构是瞬时变化的，并立即获得与变形速率相对应的剪切应力和表观黏度；依时性指的是在保持一定变形速率的情形下，与之相对应的结构调整缓慢，在结构调整的时段内，流体的流变性取决与所积累的应变，进而表现出时间的依赖性，直至新的稳态结构形成，剪切应力和表观黏度才得以稳定。可见，不管对于依时性流体还是非依时性流体，变黏度的本质都是因为内部结构改变导致剪切应力与剪切速率的关系发生变化，只不过依时性流体的结构改变与应变直接相关，而非依时性流体的结构改变与应变速率直接相关。

对于简单的非牛顿流体（如**宾汉塑性流体**），可通过将动力黏度 μ 表示为关于时空的函数进行计算植入，如低剪切速率下的黏度特别大，剪切速率超过一定值之后，黏度为定值。商用化软件 Moldflow 提供了各种黏度模型（图 4.3~图 4.5），本质上是针对不同的高分子材料，建立了黏度、剪切速率、温度、压力等因素之间的关系，计算时也是将动力黏度 μ 表示为关于时空的函数进行计算植入^[2]。

- 更改粘度模型或参数
- 双层面 Tait pvT 模型
- Cross-WLF 粘度模型
- 拉伸粘度模型
- Herschel-Bulkley-WLF 粘度模型
- 接合点损失模型
- 矩阵粘度模型
- Moldflow 第二顺序粘度模型
- 底层覆晶封装的粘度模型
- 反应粘度模型
- N-th 顺序固化动力学模型
- Mori-Tanaka 微机械模型
- 预塑多孔性与渗透性模型
- 动态表面张力模型
- 冷却液粘度模型
- 电磁场建模
- 感应加热的有限元公式
- 滑移速度模型
- 拟合经典成核模型
- 微孔发泡注射成型的粘度模型
- 用于微孔发泡注射成型的表面张力模型
- 微孔发泡注射成型的气体扩散模型
- 微孔发泡注射成型的气体溶解度模型

图 4.3 Moldflow 的黏度模型

Cross-WLF 粘度模型

Cross-WLF 粘度模型可表示基于热塑性材料粘度的温度、剪切速率和压力的相关性。

$$\eta = \frac{\eta_0}{1 + \left(\frac{\eta_0 \dot{\gamma}}{\tau^*}\right)^{1-n}}$$

其中:

- η 为熔体粘度 (Pa s)
- η_0 为零剪切粘度, 或“牛顿限制” (在这种情况下, 当剪切速率非常低时, 粘度接近一个常数),
- $\dot{\gamma}$ 为剪切速率 (1/s)
- τ^* 表示在转变为剪切致稀时的临界应力级别, 由曲线拟合确定,
- n 表示高剪切速率方法中的幂律指数, 由曲线拟合确定。

零剪切粘度可表示为以下方程:

$$\eta_0 = D_1 \exp\left[-\frac{A_1(T - T^*)}{A_2 + (T - T^*)}\right]$$

其中

- T 为温度 (K)
- T^* 为玻璃化转变温度, 由曲线拟合确定,
- $A_2 = \bar{A}_2 + D_3 p$
- p 为压力 (Pa), 其中,
- D_1 、 A_1 、 \bar{A}_2 和 D_3 为数据拟合系数。

玻璃化转变温度可表示为以下方程: $T^* = D_2 + D_3 p$ 其中, D_2 是拟合数据系数。

图 4.4 Moldflow 的黏度模型: Cross-WLF 黏度模型

Herschel-Bulkley-WLF 黏度模型

Herschel-Bulkley-WLF 黏度模型可用于显示屈服应力的热固性材料。此模型可用于反应成型分析、微芯片封装分析或底层覆晶封装分析中。

以下方程可用于确定这些材料的黏度： $\eta = \frac{\tau_y}{\dot{\gamma}} + K\dot{\gamma}^{(n-1)} = \left(\frac{K\tau^{(n-1)}}{1-\tau_y/\tau}\right)^{1/n}$ 其中：

- η 为黏度 (Pa. sec),
- $\dot{\gamma}$ 为剪切速率 (1/sec),
- K 为 WLF 黏度,
- τ 为剪切应力,
- $\tau_y = \tau_{y0} \exp\left(\frac{T_y}{T}\right)$
- T 为温度 (K),
- n 、 τ_{y0} 和 T_y 为数据拟合系数。

Williams-Landel-Ferry 模型 (或简称 WLF) 通常用于熔化聚合物或其他具有玻璃化转变温度的液体, 通常表示为 $K = K_0 \exp\left[-\frac{C_a(T-T_g)}{C_b+(T-T_g)}\right]$, 其中

- $K_0 = K_{00} \left(\frac{\alpha_g}{\alpha_g - \alpha}\right)^{(C_1 + C_2 \alpha)}$
- α 为固化程度 (0-1) 和
- C_a 、 C_b 、 K_{00} 、 C_1 、 C_2 和 T_g (明胶转化) 为数据拟合系数。

注意: 此模型可用于在低剪切速率时显示屈服行为的热固性材料。对于在低剪切速率时不显示屈服行为的材料, 可以使用反应黏度模型。对于底层覆晶封装, 可以使用底层覆晶黏度模型。

图 4.5 Moldflow 的黏度模型: Herschel-Bulkley-WLF 黏度模型

需要说明的是, Moldflow 黏度模型中的剪切速率 $|\dot{\gamma}|$ 是标量, 其是由处理变形速率张量 ε 得到的^[3]:

$$|\dot{\gamma}| = \sqrt{2\Pi} = \sqrt{2\varepsilon : \varepsilon} \quad [4.3]$$

其中, Π 为变形速率张量 ε 的不变量, 为标量, 其值为变形速率张量 ε 的双点积, 即变形速率张量 ε 乘以变形速率张量 ε 所得二阶张量的对角线元素和。

将变形速率张量 ε 的分量代入式[4.3]可得:

$$|\dot{\gamma}| = \sqrt{2\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + 2\left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)^2 + 2\left(\frac{\partial w}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}\right)^2} \quad [4.4]$$

因此, 本质上 Moldflow 将高分子溶液当作牛顿流体在处理, 即所谓的广义牛顿流体。

对于金属液态成形而言, 当合金液在熔点以上过热温度较高时, 可将合金液视为牛顿流体。对于所谓的流变铸造(半固态铸造)而言, 半固态金属浆料表现出宾汉流体的特性, 即只有当剪切应力大于一定值时, 浆料才可发生变形; 当浆料发生变形后, 其表观黏度又表现出随剪切速率变化而变化, 因此, 可称半固态金属浆料为非线性宾汉流体。此时, 如果将半固态金属浆料视为广义牛顿流体来处理, 可以处理为低剪切速率下的黏度特别大, 剪切速率超过一定值之后, 黏度满足“幂定律”模型^[4]:

$$\mu_a = K\dot{\gamma}^{n-1} \quad [4.5]$$

上述处理非牛顿流体的过程中, 仍然将流体视为牛顿流体(广义牛顿流体), 只是建立了黏度和剪切速率、温度、压力等因素的关系, 可以用于处理非线性黏度(假塑性流体、胀塑性流体)以及线性/非线性宾汉流体(黏塑性流体)。这

些处理只考虑了非牛顿流体的非线性黏性和黏塑性，我们可以把这一类处理方法称为广义牛顿流体（**Generalized Newtonian Fluid, GNF**）处理方法。事实上，在 高分子领域有较多的 GNF 模型，图 4.6 为开源非牛顿流体力学求解器 rheoTool 中的 GNF 模型^[5]。

Table 4.1: Available constitutive models in the *constitutiveEquations* library.

| GNF models | | |
|----------------------------------|------------------------|---|
| Model | ¹ TypeName | $\eta_s(\dot{\gamma})$ |
| Newtonian | <i>Newtonian</i> | η |
| ² (Bounded) Power-Law | <i>PowerLaw</i> | $\max[\eta_{\min}, \min(\eta_{\max}, k \dot{\gamma}^{n-1})]$ |
| Carreau-Yasuda | <i>CarreauYasuda</i> | $\eta_{\infty} + (\eta_0 - \eta_{\infty})[1 + (k\dot{\gamma})^a]^{\frac{n-1}{a}}$ |
| ² Herschel-Bulkley | <i>HerschelBulkley</i> | Bounded: $\min(\eta_0, \tau_0 \dot{\gamma}^{-1} + k \dot{\gamma}^{n-1})$ ³ Papanastasiou reg.: $\min\{\eta_0, \tau_0 \dot{\gamma}^{-1} [1 - \exp(-m\dot{\gamma})] + k \dot{\gamma}^{n-1}\}$ |
| ² Casson | <i>Casson</i> | Bounded: $\max\left\{\eta_{\min}, \min\left[\eta_{\max}, \left(\sqrt{\eta_{\infty}} + \sqrt{\frac{\tau_0}{\dot{\gamma}}}\right)^2\right]\right\}$ Papanastasiou reg.: $\left\{\sqrt{\eta_{\infty}} + \sqrt{\frac{\tau_0}{\dot{\gamma}}} [1 - \exp(-\sqrt{m\dot{\gamma}})]\right\}^2$ |

¹ Corresponds to the name entry identifying the model in the source code.

² Special care is taken in these models to avoid division by zero when $\dot{\gamma}$ is zero or very small and $n - 1 < 0$. For $\dot{\gamma} < VSMALL$, the value $\dot{\gamma} = VSMALL$ is used in the computation of the shear viscosity ($VSMALL = 10^{-300}$ for versions using double precision).

³ The original Papanastasiou regularization does not include the artificial upper-bounding by η_0 . However, this bounding is needed to avoid an infinite viscosity for $\dot{\gamma} \rightarrow 0$ (e.g. startup of flow) and $n < 1$. The original Papanastasiou regularization is recovered for $\eta_0 \rightarrow \infty$. In practice, η_0 should be low enough to avoid an infinite viscosity in quiescent conditions and high enough to allow Papanastasiou regularization to take control in the remaining situations.

Notes:

- $\dot{\gamma} = \sqrt{\frac{\dot{\gamma}:\dot{\gamma}}{2}}$, with $\dot{\gamma} = \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T$.
- \mathbf{I} is the identity tensor and $\frac{D\phi}{Dt}(\phi) = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi$ represents the material derivative of the generic variable ϕ .
- $\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nabla \mathbf{u}^T \cdot \boldsymbol{\tau}$ is the upper-convected derivative of $\boldsymbol{\tau}$.
- $\overset{\square}{\boldsymbol{\tau}} = \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} + \zeta(\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{D} \cdot \boldsymbol{\tau})$ is the Gordon-Schowalter derivative of $\boldsymbol{\tau}$, with $\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)$.

图 4.6 rheoTool 求解器中的 GNF 模型

本质上，所有的 GNF 模型都是在描述剪切应力与剪切速率的关系。但是，在一些复杂的非牛顿流体中，尤其是高分子溶液，由于高分子的存在使得流体具有一定的弹性特性。弹性力与黏性力是两种截然不同的作用力，从受力状态的角度来看，弹性力会引起法向应力差（这里的法向应力差指的是非牛顿流体在剪切流场中，法向应力的差值不为零，法向应力差是非牛顿流体弹性的主要表现），而黏性力不会，故 GNF 模型无法描述流体的弹性特征。反映材料物理性质之间的关系式，统称为本构方程（或本构关系）。在固体力学中，本构方程一般专指应力张量与应变张量之间的关系。在流体力学中，本构方程是指应力张量与应变率张量之间的关系。流变学是力学在 20 世纪与化学、物理、工程科学交叉发展的新兴学科。流变学作为研究物质流动与变形规律的科学，其已成为高分子领域不可或缺的研究分支，高分子流变学在指导材料配方设计、加工工艺优化、成型模具设计等方面具有重要作用。近年来，流变学已在金属材料成形领域得到越来越多的重视，金属流变学在液态金属充型过程预测、半固态浆料制备与挤压、热锻工艺优化等方面展现出极大优势。流变学综合考虑时间、温度等因素，将高温

蠕变、应力松弛与黏弹塑性流动及变形有机地结合起来，借助流变学描述材料本构关系已成为国际上的发展方向与趋势。

当我们采用流变学的方法来描述非牛顿流体（尤其是对于黏弹性流体和黏弹塑性流体）时，就不能将其简单地处理成广义牛顿流体，因为广义牛顿流体本质上只考虑了流体的黏性，所有的 GNF 模型只是在调整流体的黏度而已。从流变学的角度出发，当我们看待一个材料时，我们不需要先在脑袋里面认定这个材料属于固体或是属于流体。因为一旦我们认定这个材料属于**固体**，我们就会通过构造**应力与应变的关系**来描述这个材料的本构行为，即用**弹性**来描述此材料；而一旦我们认定这个材料属于**流体**，我们就会通过构造**应力与应变速率的关系**来描述这个材料的本构行为，即用**黏性**来描述此材料。流变学认为所有材料同时具备黏性和弹性两个特性，即所有材料都是黏弹性流体，而之所以固体（如山川）与液体（如水）的表现差异如此之大，是因为我们观测它们的时间与它们自身的松弛时间之间的相对大小所造成的。这里我们首先需要引入两个流变学概念：

● 松弛时间（Relaxation time）

在统计力学和热力学中，松弛时间表示系统由不稳定态趋于某稳定态所需的时间。在这里，我们可以认为松弛时间是材料的一种属性。松弛时间长意味着材料在受到作用力后，需要很长时间才能显现变形（即达到某稳定态），**固体的松弛时间很长**；松弛时间短意味着材料在受到作用力后，很快就能显现变形，**液体的松弛时间很短**。

● 过程时间（Process time）

过程时间也被称为**观察时间**，过程时间指的是我们观察这个现象所用的时间，或者指的是发生这个现象所用的时间，所以过程时间本质上是一个外界量，某种意义上是可以人为控制的，比如我们可以站在山峰上，用一天的时间来观察山川，也可以用一年的时间，甚至一万年、百万年……（站在山峰上百万年自然是不可能的，但我们可以一直记录山川的变化），那么**观察山川的时间就是过程时间**；我们将铁块放置在水面上，我们可以轻轻地放上去然后松手，也可以将铁块从水面上方 10 m 处自由落体然后接触水面，甚至可以采用某种方法让铁块以时速 600 km/h 撞击水面，那么**铁块接触水面这个现象所用的时间就是过程时间**。

既然流变学将所有材料都视为黏弹性材料，但为什么在我们看来山川和水是如此的不一樣呢？是因为我们往往默认此时的过程时间是我们人类所能感受到的时间，对观察山川而言，我们默认的过程时间短则 1 分钟，长则 1 天（试想一下，你可不会在山峰上待一个月吧？）；对铁块接触水面而言，我们默认的过程时间差不多在 0.1 s~0.01s 之间（这个过程时间差不多就是你将铁块用力甩向水面时铁块接触水面这个现象所用的时间）。上面我们已经提到，固体（如山川）的松弛时间很长，可以认为在十万年以上，而液体（如水）的松弛时间很短，可以

认为在微秒量级。流变学认为不同的黏弹性流体之所以表现各异，在于我们观测它们的时间（过程时间）与它们自身的松弛时间（松弛时间）之间的相对大小所造成的。于是，为量化对比这两个时间的相对大小，流变学领域出现了两个无量纲数：

- **魏森贝格数（Weissenberg number）**

魏森贝格数 Wi 的定义如下：

$$Wi = \frac{\text{弹性力}}{\text{黏性力}} = \frac{\text{第一法向应力差}}{\text{剪切应力}} = \dot{\gamma} \lambda_f \quad [4.6]$$

式中， $\dot{\gamma}$ 为剪切速率； λ_f 为材料的松弛时间。当 $Wi \gg 1$ 时，**弹性力占主导**，此时材料表现出似固体的力学响应，故采用弹性模量（应力与应变的关系）进行力学行为表征；当 $Wi \ll 1$ 时，**黏性力占主导**，此时材料表现出似流体的力学响应，故采用黏度（应力与应变速率的关系）进行力学行为表征；当 $Wi \approx 1$ 时，**弹性力和黏性力均起主要作用**，此时材料表现出黏弹性的力学响应，故不能单独地采用弹性模量或黏度，而需要建立应力与应变及应变速率的关系以表征力学行为。

以铁块接触水面这个现象为例，如上面所述，我们默认的过程时间在 0.1 s~0.01s 之间，而水的松弛时间在微秒量级，可知此时的魏森贝格数在 $10^{-5} \sim 10^{-4}$ 之间（**剪切速率与过程时间成反比**），故我们觉得水只有黏性。想象一下，当铁块以时速 600 km/h 撞击水面时，铁块接触水面这个现象的过程时间处于微秒量级，甚至更短，可知魏森贝格数很可能大于 1，甚至远大于 1，此时的水就会表现出类似固体的力学响应，这也是为什么**飞机在海上迫降是十分危险的**（图 4.7，过程时间很短）。



图 4.7 海上迫降飞机

- **德博拉数（Deborah number）**

德博拉数 De 的定义如下：

$$De = \frac{\text{松弛时间}}{\text{过程时间}} = \frac{\lambda_f}{\lambda_t} \quad [4.7]$$

式中， λ_f 为松弛时间； λ_t 为过程时间。与魏森贝格数一样，当 $De \gg 1$ 时，**弹性力占主导**，此时材料表现出似固体的力学响应，故采用弹性模量（应力与应变的关系）进行力学行为表征；当 $De \ll 1$ 时，**黏性力占主导**，此时材料表现出似流体的力学响应，故采用黏度（应力与应变速率的关系）进行力学行为表征；当 $De \approx 1$ 时，**弹性力和黏性力均起主要作用**，此时材料表现出黏弹性的力学响应，故不能单独地采用弹性模量或黏度，而需要建立应力与应变及应变速率的关系以表征力学行为。

以观察山川为例，如上面所述，我们默认的过程时间为1天，而山川的松弛时间被认为在十万年以上，可知此时的德博拉数在 10^7 量级，故在我们眼里山川是绝对的固体。但是，当我们从地质学角度来观察山川时，所采用的观察时间往往以百万年，甚至亿年为单位，可知德博拉数接近1，甚至远小于1，此时在我们眼里山川应该是可流动的。山川的岩石上有类似皱纹的褶曲结构，这就是岩石在流动的证据（图4.8）。

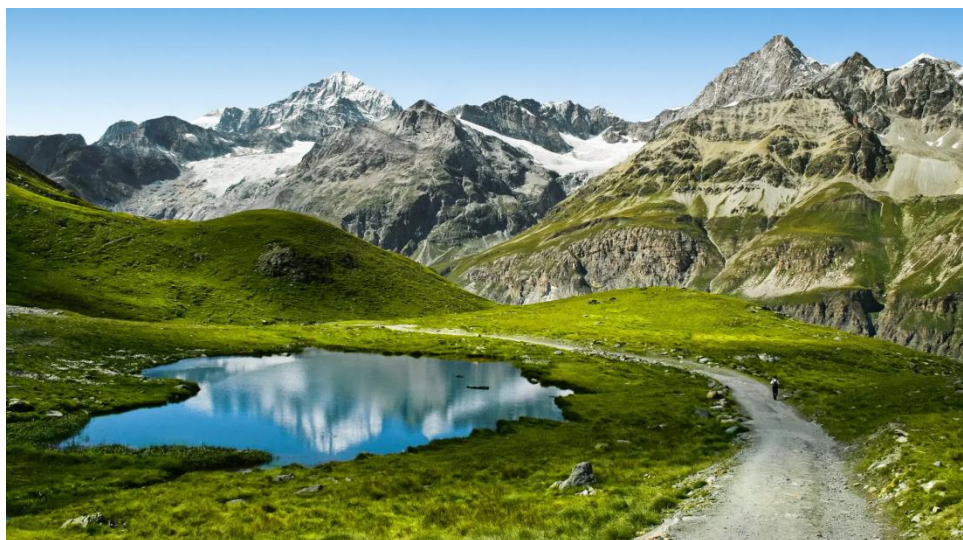


图 4.8 山川

需要说明的是，魏森贝格数 Wi 与德博拉数 De 似乎是类似的，但它们具有不同的物理解释。魏森贝格数 Wi 表示由变形产生的各向异性或取向的程度，适用于描述具有恒定拉伸历史（如简单剪切）的流动。相反，德博拉数 De 应用于描述具有非常规拉伸历史的流动，并且表示弹性能量被储存或释放的速率。另外，由于描述非牛顿流体时经常使用剪切速率 $\dot{\gamma}$ ，所以，使用魏森贝格数 Wi 的频次会高一些。

通过上述的说明，想必读者应该已感受到流变学的基本思想，从流变学角度来看，没有绝对的固体，也没有绝对的液体，这也是流变学所倡导的“万物皆流”的由来。“万物皆流”的思想可追溯到先贤孔子的“逝者如斯夫，不舍昼夜”以及同时代的古希腊哲学家 Heraclitus 所说的“**panta rhei**”（万物皆流），流变学

的英文 Rheology 一词就来源于此。

可见，当我们描述黏弹性流体的力学行为时，我们需要建立应力张量（在流变学中被称为附加应力张量）与剪切应变及剪切应变速率之间的关系。这里只对黏弹性流体的本构模型和数值计算做简单说明，从数学层面来看，此时需要植入附加应力张量 τ 的传输方程，然后对其求散度项，代入到动量方程中再进行显式离散计算^[6]。这种处理方式与广义牛顿流体的处理方式有着本质区别，最重要的区别在于在动量方程中将溶剂和高分子对附加应力张量的贡献分开处理，其中溶剂的黏性贡献采用牛顿黏性定律来描述，高分子的黏弹塑性贡献采用求解相应的高分子应力张量方程来描述（高分子应力张量包含了剪切应力与弹性应力）。下面以文献^[7]所提出的非牛顿流体本构模型为例，说明如何使用这种方式来描述黏弹性、黏塑性以及黏弹塑性流体：

$$\rho \left(\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla \bar{U} \right) = \nabla \cdot (-p\mathbf{I} + \tau_s + \tau_p) + \bar{F} \quad [4.8]$$

其中：

$$\tau_s = \mu_s \dot{\gamma} \quad [4.9]$$

$$\lambda \overset{\nabla}{\tau}_p + \max \left(0, \frac{|\tau_{pd}| - \tau_0}{|\tau_{pd}|} \right) \tau_p - \mu_p \dot{\gamma} = 0 \quad [4.10]$$

$$\lambda = \frac{\mu_p}{E} \quad [4.11]$$

$$\tau_{pd} = \tau_p - \frac{1}{3} \text{tr}(\tau_p) \mathbf{I} \quad [4.12]$$

式中， τ_s 和 τ_p 分别表示溶剂和高分子对附加应力张量的贡献， τ_s 为牛顿黏性应力张量， τ_p 代表了高分子的黏弹塑性作用； λ 为松弛时间，其被视为动力黏度与弹性模量的比值； $\overset{\nabla}{\tau}_p$ 为张量 τ_p 的随体导数； τ_{pd} 为张量 τ_p 的偏张量； τ_0 为表征塑性流体的临界剪切应力。

式[4.8]~式[4.10]描述的是黏弹塑性流体，对其进行修改可用于描述其他非牛顿流体：

- 当 $\tau_0 = 0$ ， $\lambda \neq 0$ 时，意味着流体受到剪切应力就马上变形，此时描述的是黏弹性流体。

$$\rho \left(\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla \bar{U} \right) = \nabla \cdot (-p\mathbf{I} + \tau_s + \tau_p) + \bar{F} \quad [4.13]$$

$$\tau_s = \mu_s \dot{\gamma} \quad [4.14]$$

$$\lambda \overset{\nabla}{\tau}_p + \tau_p - \mu_p \dot{\gamma} = 0 \quad [4.15]$$

- 当 $\lambda = 0$, $\tau_0 \neq 0$ 时, 意味着流体的松弛时间为 0, 即受到外力后, 流体就立刻达到新的平衡态, 没有类似于固体弹性的表现, 此时描述的是**黏塑性流体**。

$$\rho \left(\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla \bar{U} \right) = \nabla \cdot (-pI + \tau_s + \tau_p) + \bar{F} \quad [4.16]$$

$$\tau_s = \mu_s \dot{\gamma} \quad [4.17]$$

$$\max \left(0, \frac{|\tau_{pd}| - \tau_0}{|\tau_{pd}|} \right) \tau_p - \mu_p \dot{\gamma} = 0 \quad [4.18]$$

- 当 $\tau_0 = 0$, $\lambda = 0$ 时, 意味着此时流体既没有弹性, 也没有塑性, 此时描述的是**牛顿流体**。

$$\rho \left(\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla \bar{U} \right) = \nabla \cdot (-pI + \tau_s + \tau_p) + \bar{F} \quad [4.19]$$

$$\tau_s = \mu_s \dot{\gamma} \quad [4.20]$$

$$\tau_p = \mu_p \dot{\gamma} \quad [4.21]$$

式[4.8]~式[4.21]只是为了说明这类处理黏弹塑性流体本构模型的方法, 我们可以把这一类处理方法称为**附加应力张量处理方法**。事实上, 在高分子流变学领域有较多的**黏弹模型**, [图 4.9](#) 为 rheoTool 求解器中的黏弹模型^[5]。

Viscoelastic models solved in the standard extra-stress or conformation tensor variables

| Model | TypeName | $\eta_s(\dot{\gamma})$ | $\eta_p(\dot{\gamma})$ | $\lambda(\dot{\gamma})$ | Constitutive Equation |
|----------------------------------|-----------------------|------------------------|---|--|--|
| Oldroyd-B | <i>Oldroyd-B</i> | η_s | η_p | λ | $\boldsymbol{\tau} + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = \eta_p(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)$ |
| WhiteMetzner (Carreau-Yasuda) | <i>WhiteMetznerCY</i> | η_s | $\eta_p[1 + (K\dot{\gamma})^a]^{\frac{n-1}{a}}$ | $\lambda[1 + (L\dot{\gamma})^b]^{\frac{n-1}{b}}$ | $\boldsymbol{\tau} + \lambda(\dot{\gamma}) \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = \eta_p(\dot{\gamma})(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)$ |
| Giesekus | <i>Giesekus</i> | η_s | η_p | λ | $\boldsymbol{\tau} + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} + \alpha \frac{\lambda}{\eta_p} (\boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{\tau}) = \eta_p(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)$ |
| ⁴ PTT | <i>PTT</i> | η_s | η_p | λ | $f \boldsymbol{\tau} + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = \eta_p(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)$ where $f = \left[1 + \frac{\epsilon \lambda}{\eta_p} \text{tr}(\boldsymbol{\tau})\right]$ (linear), $f = \left[e^{\frac{\epsilon \lambda}{\eta_p} \text{tr}(\boldsymbol{\tau})}\right]$ (exponential) or $f = \Gamma(\beta) E_{\alpha, \beta} \left(\frac{\epsilon \lambda}{\eta_p} \text{tr}(\boldsymbol{\tau})\right)$ (generalized) |
| FENE-CR | <i>FENE-CR</i> | η_s | η_p | λ | $\left[1 + \lambda \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{\lambda}\right)\right] \boldsymbol{\tau} + \frac{\lambda}{\lambda} \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = \eta_p(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)$ where $f = \frac{L^2 + \frac{\lambda}{\eta_p} \text{tr}(\boldsymbol{\tau})}{L^2 - 3}$ |
| FENE-P | <i>FENE-P</i> | η_s | η_p | λ | $\boldsymbol{\tau} + \frac{\lambda}{\lambda} \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = \frac{a \eta_p}{L^2 - 3} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) - \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{\lambda}\right) [\lambda \boldsymbol{\tau} + a \eta_p \mathbf{I}]$ where $f = \frac{L^2 + \frac{\lambda}{\eta_p} \text{tr}(\boldsymbol{\tau})}{L^2 - 3}$ and $a = \frac{L^2}{L^2 - 3}$ |
| ⁵ Rolie-Poly | <i>Rolie-Poly</i> | η_s | η_p | λ_D | $\lambda_D \overset{\nabla}{\mathbf{A}} = -(\mathbf{A} - \mathbf{I}) - 2k \frac{\lambda_D}{\lambda_B} \left(1 - \sqrt{3/\text{tr}(\mathbf{A})}\right) \left[\mathbf{A} + \beta \left(\frac{\text{tr}(\mathbf{A})}{\lambda_B}\right)^\delta (\mathbf{A} - \mathbf{I})\right]$ where $k = \frac{\left(3 - \frac{\lambda^2}{\lambda_{\text{max}}^2}\right) \left(1 - \frac{1}{\lambda_{\text{max}}}\right)}{\left(1 - \frac{\lambda^2}{\lambda_{\text{max}}^2}\right) \left(3 - \frac{1}{\lambda_{\text{max}}}\right)}$ and $\chi = \sqrt{\frac{\text{tr}(\mathbf{A})}{3}}$ |
| eXtended Pom-Pom | <i>XPomPom</i> | η_s | η_p | λ_B | $f \boldsymbol{\tau} + \lambda_B \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} + \alpha \frac{\lambda_B}{\eta_p} (\boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{\tau}) + \frac{\eta_p}{\lambda_B} (f - 1) \mathbf{I} = \eta_p(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)$ where $f = 2 \frac{\lambda_B}{\lambda_C} e^{\frac{\alpha}{\lambda_C} (A-1)} \left(1 - \frac{1}{A^{n+\tau}}\right) + \frac{1}{A^2} \left[1 - \frac{\alpha}{3} \frac{\text{tr}(\boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{\tau})}{(\eta_p/\lambda_B)^2}\right]$ and $A = \sqrt{1 + \frac{\text{tr}(\boldsymbol{\tau})}{3 \eta_p/\lambda_B}}$ |

⁴ $\Gamma()$ is the Lambda function and $E_{\alpha, \beta}()$ is the generalized Mittag-Leffler function. See Ref. [11] for the generalized variant.⁵ See Ref. [33]. This model is exclusively solved in the conformation tensor variable, which is then converted to $\boldsymbol{\tau}$ using, $\boldsymbol{\tau} = \frac{\eta_p}{\lambda_D} k(\mathbf{A} - \mathbf{I})$.

图 4.9 rheoTool 求解器中的黏弹模型 (Oldroyd-B、WhiteMetzner、Giesekus、PTT、FENE-CR、FENE-P 均以单链高分子为研究对象, 未考虑高分子链之间的相互作用, 而且从唯象模型出发, 适用于稀溶液; Rolie-Poly、eXtended Pom-Pom 考虑了高分子链之间的相互作用, 适用于浓溶液; 这些模型描述的都是各向同性流体)

需要说明的是, 这里只是对非牛顿流体本构模型以及流变学做了简要的介绍, 流变学是一个典型的多学科交叉领域, 对流变学与非牛顿流体感兴趣的读者可以进一步查阅相关书籍。

参考资料:

- [1] 王振东. 诗情画意谈力学[M], 北京: 高等教育出版社, 2008.
- [2] Moldflow 软件的官方帮助文档.
- [3] 非牛顿流体力学学习资料. p.20-p.21.
- [4] 吴树森. 材料成形原理(第 3 版). p.22-p.24.
- [5] rheoTool 6.0 用户手册. p.40-p.44.
- [6] Favero J L, Secchi A R, Cardozo N S M, Jasak H. Viscoelastic fluid analysis in internal and in free surface flows using the software OpenFOAM[J]. Computers and Chemical Engineering, 2010, 34: 1984-1993.
- [7] Saramito P. A new constitutive equation for elastoviscoplastic fluid flows[J]. J. Non-Newtonian Fluid Mech., 2007, 145: 1-14.
- [8] 图片来源于网络.

五、唯象本构模型

对于实际的流体或固体，其应力（力） τ 与应变（变形） γ 的关系是较为复杂的。为了直观且简便地描述材料的黏弹塑性特征，人们提出了所谓的**唯象模型**（或称为**元件模型**），可以认为唯象模型是试验现象的概括与提炼，其并没有深入解释的作用。下面首先对三类唯象模型（**弹性元件**、**黏性元件**、**塑性元件**）进行单独介绍：

- **弹性元件（胡克弹性体）：弹簧（图 5.1）**



图 5.1 弹簧元件

参数：弹簧弹性模量 G

力与变形关系：

$$\tau = G\gamma \quad [5.1]$$

物理含义：力与变形成正比，施加力就马上有一定的变形，撤销力就马上恢复原状（可逆）。

- **黏性元件（牛顿黏性体）：黏壶（图 5.2）**

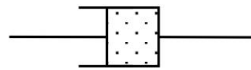


图 5.2 黏壶元件

参数：黏壶黏度 μ

力与变形关系：

$$\tau = \mu\dot{\gamma} \quad [5.2]$$

物理含义：力与变形速率成正比，施加力不会立马出现变形，力一直存在变形也会一直增长，撤销力变形会永久保存下来（不可逆）。

- **塑性元件（圣维南塑性体）：滑块（图 5.3）**



图 5.3 滑块元件

参数：滑块屈服极限 τ_e

力与变形关系：

$$\begin{cases} \tau = \tau_s & \tau_s \leq \tau_e \\ \tau = \tau_e & \tau_s > \tau_e \end{cases} \quad [5.3]$$

物理含义：当施加的力 τ_s 小于屈服极限 τ_e 时，滑块不发生变形，滑块两端受力为 τ_s ；当施加的力 τ_s 达到或超过屈服极限 τ_e 时，滑块发生不可逆变形，滑块两端受力为 τ_e 。事实上，滑块元件往往与黏壶元件并联使用，以此确定滑块发生滑动之后的变形，后面会具体说明。

弹簧、黏壶以及滑块被称为**基本元件**，往往我们需要将三种基本元件进行串并联以描述复杂的应力应变关系。组合时，可以使用多个相同的基本元件（参数不同），也可以使用不同的基本元件。如果需要自己组合唯象本构模型，推导应力应变时，可以将应力（力）视为电流，将应变（变形）视为电压。下面对四种典型的唯象本构模型进行说明：

● **Maxwell 模型（麦克斯韦体，黏弹性模型）**^[1]（图 5.4）

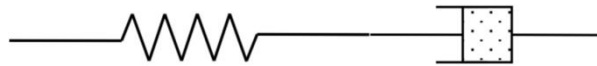


图 5.4 Maxwell 模型

流变方程：Maxwell 模型是一个弹簧元件与一个黏壶元件的串联，两个元件的受力均为 τ ，总变形 γ 为两个元件变形之和。

$$\dot{\gamma} = \frac{\dot{\tau}}{G} + \frac{\tau}{\mu} \quad [5.4]$$

（式中， $\dot{\tau}$ 和 $\dot{\gamma}$ 分别为应力变化速率和应变速率； G 为弹性模量； μ 为黏度）

变形特点：既可以瞬时变形，又可以无限变形。

蠕变方程：蠕变是保持应力 τ_0 ，看应变 γ 的变化。可以看出，此时的蠕变效果是一开始就有一定的弹性变形，之后随着时间的流逝，黏性变形保持线性增长。

$$\gamma = \frac{\tau_0}{\mu} t + \frac{\tau_0}{G} \quad [5.5]$$

回弹： t_1 时刻卸载后，弹性变形（ $\frac{\tau_0}{G}$ ）立刻恢复，而黏性变形（ $\frac{\tau_0}{\mu} t_1$ ）保留下来。

应力松弛方程：应力松弛是保持应变 γ_0 ，看应力 τ 的变化。可以看出，此时的应力松弛效果是刚开始时应变全部由弹簧承担了，所以初始应力为 $G\gamma_0$ ；随着

时间的流逝，应变逐渐被黏壶分担，直至弹簧完全不承担应变，应力也就变为了0。

$$\tau = G\gamma_0 \exp\left[\left(-\frac{G}{\mu}\right)t\right] = G\gamma_0 \exp\left(-\frac{t}{\lambda}\right) \quad [5.6]$$

(式中， $\lambda = \frac{\mu}{G}$ 为松弛时间)

● **Kelvin 模型** (开尔文体, 黏弹性模型) [1] (图 5.5)

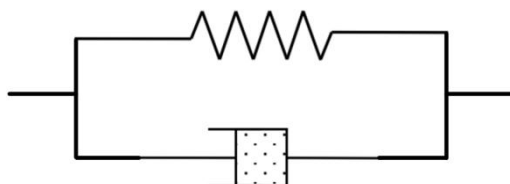


图 5.5 Kelvin 模型

流变方程: Kelvin 模型是一个弹簧元件与一个黏壶元件的并联, 两个元件的变形均为 γ , 总受力 τ 为两个元件的受力之和。

$$\tau = G\gamma + \mu\dot{\gamma} \quad [5.7]$$

变形特点: 既不能瞬时变形, 也不能无限变形。

蠕变方程: 蠕变是保持应力 τ_0 , 看应变 γ 的变化。可以看出, 此时的蠕变效果是一开始由于黏壶的阻碍作用, 应力全部由黏壶承担了, 所以应变为 0; 随着时间的流逝, 黏壶开始发生变形, 弹簧逐渐开始承担应力, 直至应力完全由弹簧承担, 所以最终的变形会稳定在 $\frac{\tau_0}{G}$ 。

$$\gamma = \frac{\tau_0}{G} \left\{ 1 - \exp\left[\left(-\frac{G}{\mu}\right)t\right] \right\} = \frac{\tau_0}{G} \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\lambda}\right) \right] \quad [5.8]$$

回弹: t_1 时刻卸载后, 弹簧的弹性变形会逐渐恢复, 同时黏壶的黏性变形也会一起逐渐恢复, 直至完全恢复。

应力松弛方程: 应力松弛是保持应变 γ_0 , 看应力 τ 的变化。可以看出, 此时的应力松弛效果是由于应变保持不变, 那么应变速率就为 0, 所以黏壶不会承担应力, 应力一直都是弹簧在承担, 应力也就一直保持不变, 即应力不会松弛。

$$\tau = G\gamma_0 \quad [5.9]$$

● **黏塑性模型** (图 5.6)

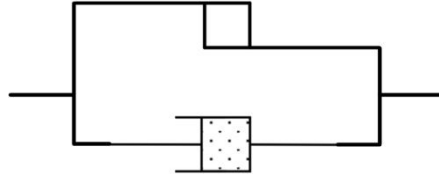


图 5.6 黏塑性模型

流变方程：此黏塑性模型是一个滑块元件与一个黏壶元件的并联。滑块与黏壶的变形相同，总受力等于滑块与黏壶受力之和。当两端受力 τ 小于滑块屈服极限 τ_e 时，不会发生变形；当两端受力大于滑块屈服极限 τ_e 时，滑块开始运动，发生变形，黏壶开始受力。

$$\begin{cases} \gamma = 0 & \tau \leq \tau_e \\ \tau = \tau_e + \mu \dot{\gamma} & \tau > \tau_e \end{cases} \quad [5.10]$$

变形特点：两端受力小于滑块屈服极限时，不会发生变形；不可以瞬时变形，可以无限变形。

蠕变方程：蠕变是保持应力 τ_0 ，看应变 γ 的变化。可以看出，此时的蠕变效果是如果 $\tau_0 \leq \tau_e$ ，应变一直就是 0，谈不上蠕变；当 $\tau_0 > \tau_e$ 时，黏壶一直承担部分的应力，所以变形会一直随着时间线性增长。

$$\begin{cases} \gamma = 0 & \tau_0 \leq \tau_e \\ \gamma = \frac{\tau_0 - \tau_e}{\mu} t & \tau_0 > \tau_e \end{cases} \quad [5.11]$$

回弹： t_1 时刻卸载后，不存在回弹，变形会保留下来。

应力松弛方程：应力松弛是保持应变 γ_0 ，看应力 τ 的变化。可以看出，此时的应力松弛效果是由于黏壶和滑块都只能发生不可逆的变形，当应变不变时，黏壶和滑块可以不受力，所以也谈不上应力松弛，事实上，只要受力小于滑块屈服极限，就可以保持应变不变。

● 黏弹塑性模型 (图 5.7)

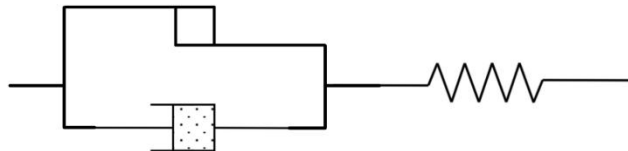


图 5.7 黏弹塑性模型

流变方程：该黏弹塑性模型是一个滑块元件与一个黏壶元件的并联，再与一个弹簧元件串联。滑块与黏壶的变形相同，滑块与黏壶的受力之和与弹簧受力相同，总变形等于滑块或黏壶的变形加上弹簧的变形。当两端受力 τ 小于滑块屈服

极限 τ_e 时, 滑块和黏壶不发生变形, 弹簧发生变形; 当两端受力大于滑块屈服极限 τ_e 时, 滑块开始运动, 滑块和黏壶发生变形, 弹簧发生变形。

$$\begin{cases} \gamma = \frac{\tau}{G} & \tau \leq \tau_e \\ \dot{\gamma} = \frac{\dot{\tau}}{G} + \frac{\tau - \tau_e}{\mu} & \tau > \tau_e \end{cases} \quad [5.12]$$

变形特点: 两端受力小于滑块屈服极限时, 只发生瞬时变形(弹性变形); 两端受力大于滑块屈服极限时, 既发生瞬时变形, 也可以无限变形。

蠕变方程: 蠕变是保持应力 τ_0 , 看应变 γ 的变化。可以看出, 此时的蠕变效果是如果 $\tau_0 \leq \tau_e$, 应变一直就是弹簧的变形; 当 $\tau_0 > \tau_e$ 时, 黏壶一直承担部分的应力, 所以变形会一直随着时间线性增长。

$$\begin{cases} \gamma = \frac{\tau_0}{G} & \tau_0 \leq \tau_e \\ \gamma = \frac{\tau_0}{G} + \frac{\tau_0 - \tau_e}{\mu} t & \tau_0 > \tau_e \end{cases} \quad [5.13]$$

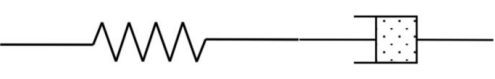
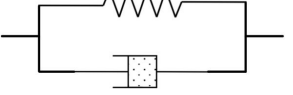
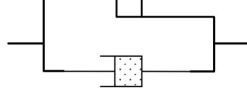
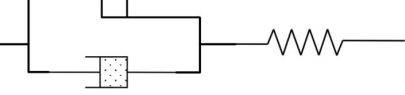
回弹: t_1 时刻卸载后, 弹性变形($\frac{\tau_0}{G}$)立刻恢复, 而黏性变形($\frac{\tau_0 - \tau_e}{\mu} t_1$)保留下来。

应力松弛方程: 应力松弛是保持应变 γ_0 , 看应力 τ 的变化。可以看出, 此时的应力松弛效果是如果 $G\gamma_0 \leq \tau_e$, 说明滑块根本不会滑动, 那么应力一直保持不变; 当 $G\gamma_0 > \tau_e$ 时, 刚开始时应变全部由弹簧承担, 所以初始应力为 $G\gamma_0$; 随着时间的流逝, 应变逐渐被黏壶或滑块分担, 弹簧承担的应变逐渐减少, 直至弹簧的受力刚好降到滑块屈服极限, 滑块和黏壶无法变形, 接下来的应力就会一直保持为滑块屈服极限。

$$\begin{cases} \tau = G\gamma_0 & G\gamma_0 \leq \tau_e \\ \tau = (G\gamma_0 - \tau_e) \exp\left(-\frac{t}{\lambda}\right) + \tau_e & G\gamma_0 > \tau_e \end{cases} \quad [5.14]$$

表 5.1 给出了上述四种唯象本构模型的对比情况。需要指出的是, 结合“*四、非牛顿流体本构模型*”中关于松弛时间的说明, **唯象模型中松弛时间 λ 其被视为黏壶黏度 μ 与弹簧弹性模量 G 的比值。**

表 5.1 四种唯象本构模型的对比

| 唯象模型 | Maxwell 模型、麦克斯韦体、黏弹性模型 | Kelvin 模型、开尔文体、黏弹性模型 | 黏塑性模型 | 黏弹塑性模型 |
|--------|---|---|--|---|
| |  |  |  |  |
| 流变方程 | $\dot{\gamma} = \frac{\dot{\tau}}{G} + \frac{\tau}{\mu}$ | $\tau = G\gamma + \mu\dot{\gamma}$ | $\begin{cases} \gamma = 0 & \tau \leq \tau_e \\ \tau = \tau_e + \mu\dot{\gamma} & \tau > \tau_e \end{cases}$ | $\begin{cases} \gamma = \frac{\tau}{G} & \tau \leq \tau_e \\ \dot{\gamma} = \frac{\dot{\tau}}{G} + \frac{\tau - \tau_e}{\mu} & \tau > \tau_e \end{cases}$ |
| 变形特点 | 既可以瞬时变形，又可以无限变形 | 既不能瞬时变形，也不能无限变形 | 两端受力小于滑块屈服极限时，不会发生变形；不可以瞬时变形，可以无限变形 | 两端受力小于滑块屈服极限时，只发生瞬时变形（弹性变形）；两端受力大于滑块屈服极限时，既发生瞬时变形，也可以无限变形 |
| 蠕变方程 | $\gamma = \frac{\tau_0}{\mu}t + \frac{\tau_0}{G}$ | $\gamma = \frac{\tau_0}{G} \left\{ 1 - \exp\left[\left(-\frac{G}{\mu} \right) t \right] \right\} = \frac{\tau_0}{G} \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\lambda} \right) \right]$ | $\begin{cases} \gamma = 0 & \tau_0 \leq \tau_e \\ \gamma = \frac{\tau_0 - \tau_e}{\mu}t & \tau_0 > \tau_e \end{cases}$ | $\begin{cases} \gamma = \frac{\tau_0}{G} & \tau_0 \leq \tau_e \\ \gamma = \frac{\tau_0}{G} + \frac{\tau_0 - \tau_e}{\mu}t & \tau_0 > \tau_e \end{cases}$ |
| 回弹 | 卸载后，弹性变形立刻恢复，而黏性变形保留下来 | 卸载后，弹簧的弹性变形会逐渐恢复，同时黏壶的黏性变形也会一起逐渐恢复，直至完全恢复 | 卸载后，不存在回弹，变形会保留下来 | 卸载后，弹性变形立刻恢复，而黏性变形保留下来 |
| 应力松弛方程 | $\tau = G\gamma_0 \exp\left[\left(-\frac{G}{\mu} \right) t \right] = G\gamma_0 \exp\left(-\frac{t}{\lambda} \right)$ | $\tau = G\gamma_0$ | 谈不上应力松弛，事实上，只要受力小于滑块屈服极限，就可以保持应变不变 | $\begin{cases} \tau = G\gamma_0 & G\gamma_0 \leq \tau_e \\ \tau = (G\gamma_0 - \tau_e) \exp\left(-\frac{t}{\lambda} \right) + \tau_e & G\gamma_0 > \tau_e \end{cases}$ |

上面所提到的这些唯象本构模型主要是为了说明如何构建唯象模型，事实上，人们采用的唯象本构各种各样，比如将多个 Maxwell 模型并行得到广义 Maxwell 模型^[1]（图 5.8），将多个 Kelvin 模型串联得到广义 Kelvin 模型^[1]（图 5.9），这里就不做过多介绍了。

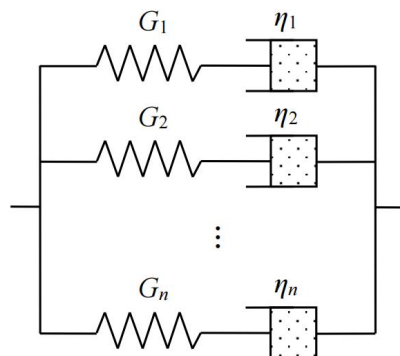


图 5.8 广义 Maxwell 模型

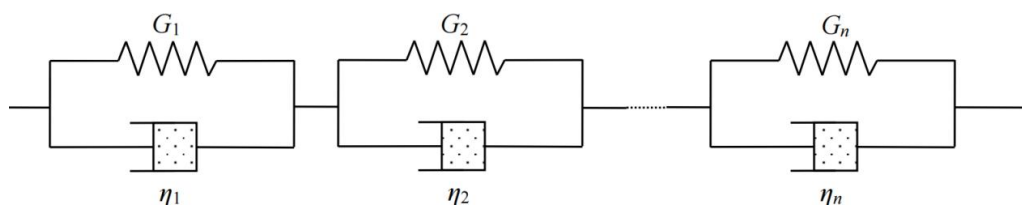


图 5.9 广义 Kelvin 模型

另外，需要指出的是，将表 5.1 与图 4.9（rheoTool 求解器中的黏弹模型）进行对比发现，流变学领域所采用的一些黏弹塑性模型就是来源于唯象模型。由于唯象模型是从单向应力应变状态出发，而三维情形下的本构模型需要描述的是应力张量与应变张量及应变速率张量之间的关系，对于流动控制方程而言，往往需要描述的是应力张量与剪切应变张量及剪切应变速率张量之间的关系。表 5.2 给出了唯象本构模型物理量与流变学本构模型物理量之间的对应关系。

表 5.2 唯象模型物理量与流变学本构模型物理量对应关系

| 唯象本构模型 | | 流变学本构模型 | |
|-------------|----------------|---------------|--|
| 物理量 | 数学形式 | 物理量 | 数学形式 |
| 应力 | τ | 黏弹塑性应力张量 | τ |
| 应力速率 | $\dot{\tau}$ | 黏弹塑性应力张量的随体导数 | $\overset{\nabla}{\tau} = \frac{\partial \tau}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla \tau - \tau \cdot \nabla \bar{U} - \nabla \bar{U}^T \cdot \tau$ (这里给出的是上随体导数) |
| 变形 | γ | 剪切应变张量 | γ |
| 变形速率 | $\dot{\gamma}$ | 剪切应变速率张量 | $\dot{\gamma} = \nabla \bar{U} + \nabla \bar{U}^T$ |
| 黏壶黏度 | μ | 黏度 | μ |
| 黏壶黏度+弹簧弹性模量 | μ, G | 黏度+松弛时间 | $\mu, \lambda = \frac{\mu}{G}$ |
| 滑块屈服极限 | τ_e | 塑性流体的临界剪切应力 | τ_e |

以 Maxwell 模型为例，式[5.15]为其唯象本构模型：

$$\dot{\gamma} = \frac{\dot{\tau}}{G} + \frac{\tau}{\mu} \quad [5.15]$$

依照表 5.2 的对应关系，可将式[5.15]改写为：

$$\nabla \bar{U} + \nabla \bar{U}^T = \frac{1}{\mu} \left(\lambda \overset{\nabla}{\tau} + \tau \right) \quad [5.16]$$

进一步可改写为：

$$\tau + \lambda \overset{\nabla}{\tau} = \mu (\nabla \bar{U} + \nabla \bar{U}^T) \quad [5.17]$$

式[5.17]即为图 4.9 中的 **Oldroyd-B 黏弹模型**。

参考资料：

[1] 非牛顿流体力学学习资料. p.31-p.35.

Copyright by Liu CAO (曹流)

六、有限差分法

热传导控制方程、流动控制方程、热对流控制方程以及后面将会介绍的（热）弹性/弹塑性力学控制方程本质上是借助**微积分**来描述材料各处应当遵守的能量守恒定律、质量守恒定律、动量守恒定律以及静力平衡状态等**物理定律**，同时为了使控制方程封闭，还会引入力与变形的关系式（本构模型），因此，当我们看控制方程的时候，其数学式几乎都涉及偏导的操作。然而，实际的传热、流动、应力演化过程往往发生在具有复杂几何外形的物体上，直接基于各类控制方程获得精确解是不现实的，甚至有些偏微分方程在数学层面上就无法获得解析解，进而引出了**数值模拟（数值计算）**的概念。

数值模拟是一个很泛的概念，可以认为凡是能通过数学计算近似地获得实际物体的温度、流动、变形等状态的方法都是数值模拟。当前，数值模拟方法本身已日渐成熟，主要可分为两大类：**欧拉方法**、**拉格朗日方法**。欧拉方法的思想是首先确定计算域，然后将计算域划分为很多小块（被称为**计算单元**，如六面体、四面体等），计算单元是由**计算节点**以及计算节点组成的面围成的，接着我们只关心计算节点的物理量（如温度），认为计算单元内的温度可以由计算节点插值得到，从而采用离散节点的物理量来近似描述连续物体的物理量分布。拉格朗日方法的思想是认为物体是由许多颗粒组成的，不关心所谓的计算域，只关心颗粒的运动，相当于盯着颗粒在看，计算时只关心颗粒运动到哪里了、与周围颗粒的作用以及将运动到哪里，所以**拉格朗日方法与欧拉方法最大的不同就是不需要划分网格**。从计算方法本身来看，欧拉方法和拉格朗日方法只是求解控制方程的不同策略，所以对于同一类问题，两种方法应该是都可以起作用的。经过多年的发展，欧拉方法主要用于描述连续介质的传热、流动及变形（如水的流动），而拉格朗日方法主要用于描述颗粒材料的运动（如粉末的堆积）。当我们研究的问题同时涉及连续介质的运动与颗粒材料的运动（如流化床）时，可以将欧拉方法与拉格朗日方法耦合起来，形成所谓的**欧拉-拉格朗日方法**。这里我们不对拉格朗日方法进行介绍，感兴趣的读者可以查阅相关书籍。

即使只针对数值模拟中的欧拉方法，其进一步的分类也种类繁多，如**有限差分法**、**有限体积法**、**有限元法**、**格子-玻尔兹曼方法**、**相场法**、**元胞自动机法**等。其中，在材料加工领域主要采用的数值模拟方法有：有限差分法（传热、流动、应力）、有限体积法（传热、流动）、有限元法（传热、应力）、相场法（微观组织）、元胞自动机法（微观组织）。本讲义会对有限差分法、有限体积法、有限元法三类方法的基本思想及数学操作进行介绍，以让读者了解这三类方法是如何从控制方程出发，经过数学处理后得到线性方程组，进而获得物理量分布的整

个过程。当然这里不会对有限差分法、有限体积法、有限元法进行深入的分析，需要深入了解以至于开展相关的编程操作的话，还需进一步学习相关书籍。

考虑到有限差分法和有限体积法是求解热传导控制方程、流动控制方程以及热对流控制方程的主流欧拉方法，所以，接下来将分别对有限差分法和有限体积法进行介绍。由于有限元法主要用于应力应变控制方程求解，故后续介绍完（热）弹性/弹塑性力学控制方程后，再对有限元法进行介绍。

有限差分法的英文全称为 **Finite Difference Method**，其英文简称为 **FDM**。首先介绍几个有限差分法中的基本概念^[1,2]：

- dx 和 dy 被称为**微分**。
- $\frac{dy}{dx}$ 和 $\frac{\partial y}{\partial x}$ 被称为**微商**。
- Δx 和 Δy 被称为**差分**。
- $\frac{\Delta y}{\Delta x}$ 被称为**差商**。
- 微分、微商与差分、差商之间的关系：

$$\frac{dy}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta y}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad [6.1]$$

● **一阶差分：**

一阶向前差分 $\Delta y = f(x + \Delta x) - f(x)$ [6.2]

一阶向后差分 $\Delta y = f(x) - f(x - \Delta x)$ [6.3]

一阶中心差分 $\Delta y = f\left(x + \frac{1}{2}\Delta x\right) - f\left(x - \frac{1}{2}\Delta x\right)$ [6.4]

● **二阶差分：**

二阶向前差分 $\Delta^2 y = \Delta(\Delta y) = f(x + 2\Delta x) - 2f(x + \Delta x) + f(x)$ [6.5]

二阶向后差分 $\Delta^2 y = f(x) - 2f(x - \Delta x) + f(x - 2\Delta x)$ [6.6]

二阶中心差分 $\Delta^2 y = f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)$ [6.7]

● **一阶差商：**

一阶向前差商 $\frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}$ [6.8]

一阶向后差商 $\frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x) - f(x - \Delta x)}{\Delta x}$ [6.9]

$$\text{一阶中心差商} \quad \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f\left(x + \frac{1}{2}\Delta x\right) - f\left(x - \frac{1}{2}\Delta x\right)}{\Delta x} \quad [6.10]$$

或

$$\frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x}$$

● 二阶差商:

$$\text{二阶向前差商} \quad \frac{\Delta^2 y}{\Delta x^2} = \frac{f(x + 2\Delta x) - 2f(x + \Delta x) + f(x)}{\Delta x^2} \quad [6.11]$$

$$\text{二阶向后差商} \quad \frac{\Delta^2 y}{\Delta x^2} = \frac{f(x) - 2f(x - \Delta x) + f(x - 2\Delta x)}{\Delta x^2} \quad [6.12]$$

$$\text{二阶中心差商} \quad \frac{\Delta^2 y}{\Delta x^2} = \frac{f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)}{\Delta x^2} \quad [6.13]$$

当 Δx 为一有限值时, 式[6.8]~式[6.10]可视为一阶导数 $\frac{dy}{dx}$ 或 $\frac{\partial y}{\partial x}$ 的近似, 式[6.11]~式[6.13]可视为二阶导数 $\frac{d^2 y}{dx^2}$ 或 $\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}$ 的近似。对于二阶混合偏导 $\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}$ 而言, 其二阶差商为 (以二阶向前差商为例):

$$\begin{aligned} & \frac{\Delta^2 f(x, y)}{\Delta x \Delta y} \\ &= \frac{\Delta}{\Delta y} \left(\frac{\Delta f(x, y)}{\Delta x} \right) \\ &= \frac{\Delta}{\Delta y} \left(\frac{f(x + \Delta x, y) - f(x, y)}{\Delta x} \right) \\ &= \frac{f(x + \Delta x, y + \Delta y) - f(x + \Delta x, y)}{\Delta x \Delta y} - \frac{\Delta f(x, y + \Delta y) - \Delta f(x, y)}{\Delta x \Delta y} \\ &= \frac{f(x + \Delta x, y + \Delta y) - f(x + \Delta x, y) - \Delta f(x, y + \Delta y) + \Delta f(x, y)}{\Delta x \Delta y} \end{aligned} \quad [6.14]$$

事实上, 有限差分法最核心的思想就是采用差商来近似微商 (导数), 因此, 差商与微商之间的误差 (即截断误差或逼近误差) 是十分关键的, 通常我们采用“具有几阶精度”来描述截断误差。通过泰勒展开可以分析各差商的截断误差, 这里不做推导, 一阶向前差商和一阶向后差商都具有一阶精度, 一阶中心差商具有二阶精度, 二阶向前差商和二阶向后差商都具有一阶精度, 二阶中心差商具有二阶精度。需要说明的是, 并不是说近似一阶导数就只能用一阶向前差商、一阶向后差商和一阶中心差商中的一种, 当我们追求高精度时, 我们可以自行构造

高精度的差商格式，比如下面的一阶差商具有三阶精度：

$$\frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x+2\Delta x) - 6f(x+\Delta x) + 3f(x) + 2f(x-\Delta x)}{2\Delta x}$$

即：

[6.15]

$$\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{f(x+2\Delta x) - 6f(x+\Delta x) + 3f(x) + 2f(x-\Delta x)}{2\Delta x} + O(\Delta x^3)$$

从式[6.15]能够很明显感受到为了获得高精度的近似，我们需要附近更多的数据，可见计算量会明显增加，因此，近似控制方程时需要综合考虑精度与计算效率两方面。另一方面，并不是所有的差商格式都可以用来近似微商，若差分格式的精度小于一阶，则说明差分方程和微分方程不相容，不相容的差分方程是无效的。式[6.14]展示了二阶向前差商来近似二阶混合偏导，只是做法上的展示，通过泰勒分析可知该差商的截断误差为 $O(\Delta y/\Delta x)$ ，当 Δx 与 Δy 接近时，我们说误差 $O(\Delta y/\Delta x)$ 远大于误差 $O(\Delta x)$ 或 $O(\Delta y)$ （一阶精度），因此，式[6.14]所示的

差商格式是不能接受的。对于二阶混合偏导 $\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}$ 而言，下面的混合偏导差商格

式的误差为 $O(\Delta x + \Delta y)$ ，精度为一阶精度，是可以接受的。

$$\frac{\Delta^2 f(x, y)}{\Delta x \Delta y} = \frac{f(x+\Delta x, y+\Delta y) - f(x+\Delta x, y-\Delta y) - f(x-\Delta x, y+\Delta y) + f(x-\Delta x, y-\Delta y)}{4\Delta x \Delta y}$$

即：

[6.16]

$$\frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x \partial y} = \frac{f(x+\Delta x, y+\Delta y) - f(x+\Delta x, y-\Delta y) - f(x-\Delta x, y+\Delta y) + f(x-\Delta x, y-\Delta y)}{4\Delta x \Delta y} + O(\Delta x + \Delta y)$$

差分格式的另一个重要性质是**收敛性**，即当时间步长 Δt 与空间步长 Δx 趋近于0时，通过差分格式计算出的解是否趋近于实际值，如果趋近说明此差分格式是收敛的。对于某给定格式是否收敛，往往需要按具体问题予以证明。因此，通常我们可以借助方程的物理意义来确定其收敛条件。大多数情况下，若遵守以下原则，差分格式可以得到较为真实的解：**使用中心差分格式、差分格式的精度不小于二阶、不违背物理规律**。差分格式的另一个重要性质是**稳定性**，即我们希望在第一步计算时引入的误差（如测量误差、舍入误差等）不会在后续计算过程越来越大。已证明，对于线性偏微分方程组的适定的初值问题，“一个与之相容的线性差分格式是收敛格式”的充分必要条件是这格式的稳定性。因此，差分格式的稳定性研究是有限差分法的重要内容。

接下来，以二维热传导方程 $\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right)$ 为例，利用有限差分法对

其进行离散。首先，将二维平面进行**网格划分**（可以想象成将二维平面划分为许多大小一致的长方形），采用 (i, j) 来代表横向第 i 位、纵向第 j 位的网格， Δx 和 Δy 分别为长方形的横向和纵向尺寸， Δt 为时间间隔， $T_{i,j}^n$ 表示第 n 时刻 (i, j) 单元的温度。这里简要说明一下为什么欧拉方法都需要划分网格，其原因是各类控制方程本质上描述的是某个点的物理变化规律，而实际物体可以认为是由无限多个点组成的，但我们根本无法描述无限多个点。于是，我们将实际物体划分为很多小分块，通过计算有限个节点上的物理量或者单元体心的物理量来近似实际的物理量分布。

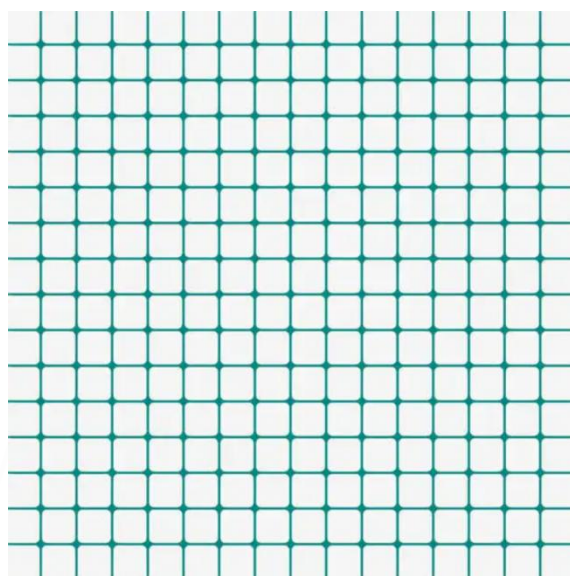


图 6.1 差分网格

将热传导方程的**时间项**进行一次向前差商，将**扩散项**进行二次中心差商，于是得到的差分格式为：

$$\frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\Delta t} = \alpha \left(\frac{T_{i+1,j}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{T_{i,j+1}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} \right)$$

即： [6.17]

$$T_{i,j}^{n+1} = \alpha \Delta t \left(\frac{T_{i+1,j}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{T_{i,j+1}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} \right) + T_{i,j}^n$$

$$\alpha = \frac{k}{\rho c} \quad [6.18]$$

式[6.17]告诉我们，如果知道了第 n 时刻所有单元的温度，那么就可以求得第 $n+1$ 时刻（即下一时刻）所有单元的温度，我们称这种求解方式为**显式求解**。显式求解的好处是不用组装线性方程组，计算快速，但缺点是需要采用足够小的时间步长（ Δt ）和空间步长（ Δx 和 Δy ），以保证解的准确性。相对应的另外一种

求解方法为**隐式求解**，如果我们对扩散项进行二次中心差商时，所有温度值均采用第 $n+1$ 时刻的温度，那么差分格式就会成为：

$$T_{i,j}^{n+1} = \alpha \Delta t \left(\frac{T_{i+1,j}^{n+1} - 2T_{i,j}^{n+1} + T_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} + \frac{T_{i,j+1}^{n+1} - 2T_{i,j}^{n+1} + T_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y^2} \right) + T_{i,j}^n \quad [6.19]$$

很明显，式[6.19]是不能单独求解的，因为多个未知量在里面，所以我们需要对所有单元都列出第 $n+1$ 时刻温度值的关系，即获得了一个多元线性方程组，进而可以获得一个矩阵等式：

$$\mathbf{A}_{m \times m} \mathbf{T}_{m \times 1} = \mathbf{B}_{m \times 1} \quad [6.20]$$

式中， m 表示单元个数； $\mathbf{A}_{m \times m}$ 为系数矩阵； $\mathbf{T}_{m \times 1}$ 为保存下一时刻所有单元温度值的向量； $\mathbf{B}_{m \times 1}$ 为载荷向量。

需要说明的是，上面只是简要地说明有限差分组装矩阵的过程，并未对**边界条件**处理等方面进行说明。如读者想深入研究有限差分法，甚至进行相关代码开发，需要进一步学习相关书籍。

参考资料：

- [1] 唐玉龙. 有限差分法.
- [2] 廖敦明. 有限差分法基础.

七、有限体积法

同有限差分法一样，有限体积法也是欧拉方法中的一种，有限体积法也主要用于计算传热与流动。表 7.1 给出了有限差分法与有限体积法优劣之处的对比^[1]。有限体积法的英文全称为 **Finite Volume Method**，英文简称为 **FVM**。

表 7.1 有限差分法与有限体积法对比

| | 有限差分法 | 有限体积法 |
|----|--------------------|-------------------|
| 优势 | 实现简单、计算效率高、易于提高精度 | 本身包含几何信息，易于处理复杂网格 |
| 劣势 | 差分离散与几何解耦，难以处理复杂网格 | 实现复杂、不易提高精度 |

由对比结果可知，有限体积法相比于有限差分法的最大优势在于，有限体积法对网格类型不做限定，即采用所谓的**非结构化网格**，可以采用四面体网格、六面体网格、多面体网格，甚至混合网格。有限体积法基于的是**积分形式的守恒方程**而不是微分方程，该积分形式的守恒方程描述的是计算网格定义的每个控制体。有限体积法着重从物理观点来构造离散方程，每一个离散方程都是有限大小体积上某种物理量守恒的表达式，推导过程物理概念清晰，离散方程系数具有一定的物理意义，并可保证离散方程具有守恒特性。

从数学处理层面来看，有限体积法首先需要选出一个**有限体积**（即单个**计算单元**，如一个四面体、一个六面体等），有限体积法认为既然微分形式的控制方程可以描述物体各处的状态，那么针对该有限体积对微分方程两端进行**积分**，所得到的积分形式的控制方程也应当是成立的。分析各类微分形式的控制方程，我们发现经常会涉及到对矢量求**散度** $\nabla \cdot \vec{F}$ ，从而使得积分形式的控制方程中就会出现 $\int_{CV} (\nabla \cdot \vec{F}) dV$ 。该项正好可以借助**高斯散度定理**进行处理：

$$\int_{CV} (\nabla \cdot \vec{F}) dV = \int_A \vec{n} \cdot \vec{F} dA \quad [7.1]$$

式[7.1]最大的好处是**把矢量散度的体积分转换为矢量乘积的面积分**，从数学计算角度来看相当于做了降维操作。进而，我们可以将重点放在如何求面积分上，并最终构造出线性方程组。

接下来，我们以**热对流控制方程** $\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p \nabla \cdot (T\vec{U}) = \nabla \cdot (k\nabla T) + S$ 为例，展示有限体积法是如何将控制方程离散得到线性方程组^[2, 3]。对于单个控制体 CV 而言，该控制体的温度 T_0 存储在该控制体的体心。针对控制体 CV ，对热对流控制方程进行体积分：

$$\int_{CV} \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} dV + \int_{CV} \rho c_p \nabla \cdot (T\bar{U}) dV = \int_{CV} \nabla \cdot (k\nabla T) dV + \int_{CV} S dV \quad [7.2]$$

将高斯散度定理代入式[7.2]可得：

$$\int_{CV} \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} dV + \int_A \bar{n} \cdot \rho c_p T\bar{U} dA = \int_A \bar{n} \cdot k\nabla T dA + \int_{CV} S dV \quad [7.3]$$

式中， A 为控制体的边界面， \bar{n} 为边界面的外法向单位向量。

在实际计算过程中，控制体的边界面即**控制面**为多个平面组成，如四面体控制单元下为4个三角形控制面，六面体控制单元下为6个四边形控制面，因此，可以将式[7.3]改写为：

$$\int_{CV} \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} dV + \sum_{all\ surfaces} \int_{A_i} \bar{n}_i \cdot \rho c_p T\bar{U} dA = \sum_{all\ surfaces} \int_{A_i} \bar{n}_i \cdot k\nabla T dA + \int_{CV} S dV \quad [7.4]$$

其中， A_i 为单个控制面， \bar{n}_i 为单个控制面所对应的外法向单位向量。

式[7.4]中的各个项，从左至右分别为：**瞬态项**、**对流项**、**扩散项**、**源项**。接下来的任务就是如何利用我们知道的（各单元中心的当前温度值、各单元中心的流速）和我们想要知道的（各单元中心的下一时刻温度值）来近似式[7.4]中的各项积分，从而得到线性方程组。下面将分别针对这四项的离散过程进行说明。

7.1 扩散项离散

式[7.4]中，单个控制面的扩散项积分为：

$$D_{f_i} = \int_{A_i} \bar{n}_i \cdot k\nabla T dA \quad [7.1.1]$$

采用 Mathur and Murthy (1997)^[4]所提出的扩散项离散公式，其适用于三维非结构化网格：

$$D_{f_i} = k \frac{T_{i,1} - T_0}{\Delta \xi_i} \frac{A_i}{\bar{n}_i \cdot \bar{e}_{\xi_i}} + k A_i \overline{\nabla T_{D_i}} \left(\bar{n}_i - \frac{\bar{e}_{\xi_i}}{\bar{n}_i \cdot \bar{e}_{\xi_i}} \right) \quad [7.1.2]$$

式中，右端的第一项为**直接梯度项**（direct gradient），右端的第二项为**二次扩散项**（secondary diffusion term）或**交错扩散项**（cross-diffusion），其表示为总扩散与主分量的差值。其中， T_0 为控制单元体心的温度值， $T_{i,1}$ 为控制面 i 的相邻单元体心的温度值（每个控制面分隔两个单元，一个为控制单元，一个为相邻单元）， $\Delta \xi_i$ 为控制单元体心 C_0 与控制面 i 的相邻单元体心 $C_{i,1}$ 的距离， A_i 为控制面 i 的面积， \bar{e}_{ξ_i} 为控制单元体心 C_0 到控制面 i 的相邻单元体心 $C_{i,1}$ 方向的单位向量（由 C_0 指向 $C_{i,1}$ ）， $\overline{\nabla T_{D_i}}$ 为控制面 i 的**平均温度扩散梯度**，其由控制面 i 两侧单元体心的

温度扩散梯度求平均:

$$\overline{\nabla T_{D_i}} = \frac{\nabla T_{D_0} + \nabla T_{D_{i,1}}}{2} \quad [7.1.3]$$

式中, ∇T_{D_0} 和 $\nabla T_{D_{i,1}}$ 分别为控制面 i 两侧单元体心的温度扩散梯度 (这里的扩散梯度是为了与对流项插值过程中使用的梯度区分开来)。需要说明的是, 如果控制面为边界面, 是不用计算平均变量扩散梯度的。下面说明如何计算控制单元体心的扩散梯度。

我们首先借助**格林-高斯定理** (Green-Gauss Theorem) 求出各单元的温度梯度 ∇T_c (注意! 温度梯度与温度扩散梯度是两个不同的概念, 后面会进一步解释):

$$\nabla T_c = \frac{1}{\Delta V} \sum_{all\ surfaces} (\bar{T}_i A_i \bar{n}_i) \quad [7.1.4]$$

式中, ΔV 为计算单元的体积, \bar{T}_i 为单元边界面的初步平均温度值, 不同的 \bar{T}_i 求法得到不同的梯度求解方案。当 \bar{T}_i 由两相邻单元体心处的温度值 T_{c0} 和 T_{c1} 决定时, 梯度方案为 **Green-Gauss Cell Based**, 如式[7.1.5]所示; \bar{T}_i 由边界面的节点温度值 \bar{T}_n 决定时, 梯度方案为 **Green-Gauss Node Based**, 如式[7.1.6]所示。

$$\bar{T}_i = \frac{T_{c0} + T_{c1}}{2} \quad [7.1.5]$$

$$\bar{T}_i = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \bar{T}_n \quad [7.1.6]$$

其中, N 为边界面的节点个数, 边界面节点的温度值 \bar{T}_n 由与其相连的单元体心温度值加权平均得到。下面依据一种由 Holmes and Connell (1989)^[5,6] 提出的加权方案, 将其推广到三维情况, 由单元温度值求得各节点的温度值:

$$T_o = \frac{\sum_{i=1}^n w_i T_i}{\sum_{i=1}^n w_i} \quad [7.1.7]$$

其中, T_o 为插值得到的节点温度值, T_i 为与节点相连的单元中心温度值, w_i 为对应单元的加权系数, n 为与节点相连的单元个数。这里不详细说明加权系数 w_i 的计算, 虽然加权系数值求解过程有些繁杂, 但是加权系数值的求解只与网格位置

有关，因此，只需求解一次。

利用式[7.1.4]~式[7.1.7]，我们已经可以计算出控制面两侧单元的单元温度梯度 ∇T_{c0} 和 ∇T_{c1} ，分别以两侧单元体心为中心对控制面温度进行插值，可得：

$$\hat{T}_{f0} = T_{c0} + \nabla T_{c0} \cdot \vec{r}_{f0} \quad [7.1.8]$$

$$\hat{T}_{f1} = T_{c1} + \nabla T_{c1} \cdot \vec{r}_{f1} \quad [7.1.9]$$

式中， \vec{r}_{f0} 和 \vec{r}_{f1} 分别为控制面中心与两侧单元体心的位置坐标向量。

为了保证由梯度插值得到的温度值限制在相邻单元温度值的范围之内，需要引入**梯度限制器** ψ （gradient limiter），这里所采用的限制器最初由Venkatakrishnan^[7]提出，后由Wang^[8]改进。需要说明的是，梯度限制器是对某个单元而言的，而且插值不同位置时，梯度限制值不一样。采用的梯度限制器 ψ 为：

$$\psi = \frac{\Delta_+^2 + 2\Delta_- \Delta_+ + \varepsilon^2}{\Delta_+^2 + 2\Delta_-^2 + \Delta_- \Delta_+ + \varepsilon^2} \quad [7.1.10]$$

$$\Delta_- = T - T_c \quad [7.1.11]$$

$$\Delta_+ = \begin{cases} T_{\max} - T_c & \text{if } \Delta_- > 0 \\ T_{\min} - T_c & \text{if } \Delta_- < 0 \end{cases} \quad [7.1.12]$$

$$\psi = 1 \quad \text{if } \Delta_- = 0 \quad [7.1.13]$$

$$\varepsilon = \varepsilon' (T^{\max} - T^{\min}) \quad [7.1.14]$$

其中， T 为计算的初始插值温度值； T_c 为单元体心温度值； T_{\max} 和 T_{\min} 分别为当前单元及其相邻单元体心温度的最大、最小值； T^{\max} 和 T^{\min} 分别为全局单元体心温度的最大、最小值； ε' 为控制参数，限制在 $\varepsilon' \in (0.01, 0.20)$ ，文献[8]中说明 $\varepsilon' = 0.05$ 时具有较好的效果。

分别对控制面两侧的单元进行梯度限制值的计算，即分别将 \hat{T}_{f0}, T_{c0} 和 \hat{T}_{f1}, T_{c1} 代入式[7.1.10]计算得到对应的梯度限制值 ψ_{f0} 和 ψ_{f1} ，进而可以得到分别以控制面两侧单元为中心时经过梯度限制器处理之后的控制面插值温度值：

$$T_{f0} = T_{c0} + \psi_{f0} \nabla T_{c0} \cdot \vec{r}_{f0} \quad [7.1.15]$$

$$T_{f1} = T_{c1} + \psi_{f1} \nabla T_{c1} \cdot \vec{r}_{f1} \quad [7.1.16]$$

于是控制面的插值温度平均值 \tilde{T}_f 为:

$$\tilde{T}_f = \frac{T_{f0} + T_{f1}}{2} \quad [7.1.17]$$

进而可得到用于离散扩散项的单元温度扩散梯度:

$$\nabla T_D = \frac{1}{\Delta V} \sum_{all\ surfaces} (\tilde{T}_f A_f \vec{n}_f) \quad [7.1.18]$$

对比式[7.1.18]与式[7.1.4]发现, 单元温度扩散梯度所采用的控制面温度为 \tilde{T}_f , 而单元温度梯度所采用的控制面温度为 \bar{T}_i , 这就是两者的不同。为了求 \tilde{T}_f , 我们需要先求单元温度梯度, 再求梯度限制值, 再求平均, 所以可以认为**单元温度扩散梯度是在单元温度梯度的基础上得到的**。

接着, 利用式[7.1.18]我们就可以求得各控制面的平均温度扩散梯度 $\overline{\nabla T_{D_i}}$ 。

我们将 $D_{f_i} = k \frac{T_{i,1} - T_0}{\Delta \xi_i} \frac{A_i}{\vec{n}_i \cdot \vec{e}_{\xi_i}} + k A_i \overline{\nabla T_{D_i}} \left(\vec{n}_i - \frac{\vec{e}_{\xi_i}}{\vec{n}_i \cdot \vec{e}_{\xi_i}} \right)$ (式[7.1.2]) 等号右端的第一项

隐式处理 (即温度用未知量表示), 将等号右端的第二项**显式处理** (即温度用已知量表示), 于是**扩散项可以离散为单元体心温度值的线性组合加上一常数项**:

$$a_{diffusion} T_0^{n+1} + \sum_i b_{i,diffusion} T_i^{n+1} + c_{diffusion} \quad [7.1.19]$$

7.2 对流项离散

式[7.4]中, 单个控制面的**对流项积分**为:

$$C_{f_i} = \int_{A_i} \vec{n}_i \cdot \rho c_p T \vec{U} dA \quad [7.2.1]$$

这里认为速度场已知, 因此**控制面速度** \vec{U}_f 为:

$$\vec{U}_f = \frac{\vec{U}_{c0} + \vec{U}_{c1}}{2} \quad [7.2.2]$$

式中, \vec{U}_{c0} 和 \vec{U}_{c1} 分别为控制面两侧单元体心的速度。如果给定的是均匀速度场, 也就不用计算控制面速度。

因此, 需要确定的是**控制面温度值** T_f , 这里采用等同式[7.1.15]和式[7.1.16]

的高阶差分格式，即借助单元温度梯度和梯度限制值求得控制面温度值：

$$T_f = T_{c\text{upwind}} + \psi_{f\text{upwind}} \nabla T_{c\text{upwind}} \cdot \vec{r}_{f\text{upwind}} \quad [7.2.3]$$

其中， $\psi_{f\text{upwind}}, \nabla T_{c\text{upwind}}, \vec{r}_{f\text{upwind}}$ 的计算等同于 $\psi_{f0}, \nabla T_{c0}, \vec{r}_{f0}$ 和 $\psi_{f1}, \nabla T_{c1}, \vec{r}_{f1}$ ，前提是需要确定控制面的哪侧单元为控制面的上游单元，上游单元的选取由 $\vec{n}_i \cdot \vec{U}_f$ 的结果确定，如果 $\vec{n}_i \cdot \vec{U}_f = 0$ ，此控制面对流项积分结果为 0。

将式[7.2.2]和式[7.2.3]代入式[7.2.1]，可得对流项的离散格式为：

$$\begin{aligned} C_{f_i} &= \int_{A_i} \vec{n}_i \cdot \rho c_p T \vec{U} dA \\ &= \vec{n}_i \cdot \rho c_p \left(T_{c\text{upwind}} + \psi_{f\text{upwind}} \nabla T_{c\text{upwind}} \cdot \vec{r}_{f\text{upwind}} \right) \frac{\vec{U}_{c0} + \vec{U}_{c1}}{2} A_i \end{aligned} \quad [7.2.4]$$

接着，将式[7.2.3]等号右端的第一项隐式处理，将等号右端的第二项显式处理，于是对流项可以离散为单元体心变量值的线性组合加上一常数项：

$$a_{\text{convection}} T_0^{n+1} + \sum_i b_{i,\text{convection}} T_i^{n+1} + c_{\text{convection}} \quad [7.2.5]$$

7.3 瞬态项离散

式[7.4]中，单个控制体的瞬态项积分为：

$$T_V = \int_{CV} \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} dV \quad [7.3.1]$$

对于温度 T 的时间导数，一般采用的方案为：一阶离散，如式[7.3.2]所示；二阶离散，如式[7.3.3]所示。

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} \quad [7.3.2]$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{3T^{n+1} - 4T^n + T^{n-1}}{2\Delta t} \quad [7.3.3]$$

分别将式[7.3.2]和式[7.3.3]代入式[7.3.1]，可得瞬态项积分的一阶离散式和二阶离散式分别为：

$$T_V = \rho c_p \frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} \Delta V \quad [7.3.4]$$

$$T_V = \rho c_p \frac{3T^{n+1} - 4T^n + T^{n-1}}{2\Delta t} \Delta V \quad [7.3.5]$$

式中， T^{n+1}, T^n, T^{n-1} 分别为下一时刻、当前时刻、前一时刻的温度值， Δt 为时间步长。如果采用二阶离散方案的话，计算第一个时间步长时先采用一阶方案，从计算第二个时间步长开始采用二阶方案。

于是，瞬态项可以离散为不同时刻温度值的线性组合：

$$a_{transient} T_0^{n+1} + \sum_i b_{i,transient} T_i^{n+1} \quad [7.3.6]$$

7.4 源项离散

式[7.4]中，单个控制体的源项积分为：

$$S_V = \int_{CV} S dV \quad [7.4.1]$$

对于源函数 S 的处理，一般采用的方案为：一阶离散，如式[7.4.2]所示；二阶离散，如式[7.4.3]所示：

$$S = \bar{S} \quad [7.4.2]$$

$$S = S_u - S_p T \quad [7.4.3]$$

式中， \bar{S} 为控制体的平均源项值，一般取做控制体体心的源项值； S_u 和 S_p 为对源函数 S 做线性化处理得到的系数； T 为所需求解的控制体体心温度值。

需要说明的是， S_u 和 S_p 可以为 T 的函数，离散过程中 S_u 和 S_p 显式处理，式[7.4.3]中 T 做隐式处理。分别将式[7.4.2]和式[7.4.3]代入式[7.4.1]，可得源项积分的一阶离散和二阶离散分别为：

$$S_V = \bar{S} \Delta V \quad [7.4.4]$$

$$S_V = (S_u - S_p T) \Delta V \quad [7.4.5]$$

于是，当采用一阶离散方式时，源项离散为一常数（式[7.4.6]）；当采用二阶离散方式时，源项可以离散为单元体心温度值乘以某个系数值，再加上一常数项（式[7.4.7]）：

$$c_{source} \quad [7.4.6]$$

$$a_{source} T_0^{n+1} + c_{source} \quad [7.4.7]$$

7.5 矩阵组装

至此，针对热对流控制方程，我们采用有限体积法对积分形式的守恒方程的各项进行了离散，归纳起来为：

热对流控制方程（微分形式）

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p \nabla \cdot (T\bar{U}) = \nabla \cdot (k\nabla T) + S \quad [7.5.1]$$

热对流控制方程（积分形式）

$$\int_{CV} \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} dV + \sum_{\text{all surfaces}} \int_{A_i} \bar{n}_i \cdot \rho c_p T \bar{U} dA = \sum_{\text{all surfaces}} \int_{A_i} \bar{n}_i \cdot k \nabla T dA + \int_{CV} S dV \quad [7.5.2]$$

扩散项离散

$$\begin{aligned} D_{f_i} &= \int_{A_i} \bar{n}_i \cdot k \nabla T dA = k \frac{T_{i,1} - T_0}{\Delta \xi_i} \frac{A_i}{\bar{n}_i \cdot \bar{e}_{\xi_i}} + k A_i \overline{\nabla T}_{D_i} \left(\bar{n}_i - \frac{\bar{e}_{\xi_i}}{\bar{n}_i \cdot \bar{e}_{\xi_i}} \right) \\ &= a_{diffusion} T_0^{n+1} + \sum_i b_{i,diffusion} T_i^{n+1} + c_{diffusion} \end{aligned} \quad [7.5.3]$$

对流项离散

$$\begin{aligned} C_{f_i} &= \int_{A_i} \bar{n}_i \cdot \rho c_p T \bar{U} dA = \bar{n}_i \cdot \rho c_p \left(T_{c \text{ upwind}} + \psi_{f \text{ upwind}} \nabla T_{c \text{ upwind}} \cdot \bar{r}_{f \text{ upwind}} \right) \frac{\bar{U}_{c0} + \bar{U}_{c1}}{2} A_i \\ &= a_{convection} T_0^{n+1} + \sum_i b_{i,convection} T_i^{n+1} + c_{convection} \end{aligned} \quad [7.5.4]$$

瞬态项离散

$$T_V = \int_{CV} \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} dV = \rho c_p \frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} \Delta V = a_{transient} T_0^{n+1} + \sum_i b_{i \text{ transient}} T_i^{n+1} \quad [7.5.5]$$

或

$$T_V = \int_{CV} \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} dV = \rho c_p \frac{3T^{n+1} - 4T^n + T^{n-1}}{2\Delta t} \Delta V = a_{transient} T_0^{n+1} + \sum_i b_{i \text{ transient}} T_i^{n+1}$$

源项离散

$$S_V = \int_{CV} S dV = \bar{S} \Delta V = c_{source} \quad [7.5.6]$$

或

$$S_V = \int_{CV} S dV = (S_u - S_p T) \Delta V = a_{source} T_0^{n+1} + c_{source}$$

按照式[7.5.3]~式[7.5.6]的处理，可以针对每个控制单元得到相应的线性方程：

$$a_0 T_0^{n+1} = \sum a_n T_n^{n+1} + S_0 \quad [7.5.7]$$

将各个单元的线性方程组装起来，即可得到求解下一时刻各单元变量值的矩阵方程式，采用相应的矩阵求解器进行求解即可：

$$AX = B \quad [7.5.8]$$

需要说明的是，上面只是对有限体积法的基本思想和离散过程进行了简要介绍，在处理其他控制方程时，并不是只能采用上述的离散方式。事实上，有限体积法的离散方法也在不断发展，如果读者需要深入研究有限体积法，甚至进行相关代码开发，还需进一步学习相关书籍^[9-11]。

参考资料：

- [1] 李新亮. 有限体积法.
- [2] 曹流. 非结构化网格下基于有限体积法的流场计算.
- [3] 曹流. 铸造充型过程中成形类缺陷演化机理及数值模拟研究[D]. p.43-p.52.
- [4] Mathur S R, Murthy J Y. A pressure-based method for unstructured meshes[J]. Numerical Heat Transfer, 1997, 31(2): 195-215.
- [5] D. G. Holmes and S. D. Connell. Solution of the 2D Navier-Stokes Equations on Unstructured Adaptive Grids[C]. AIAA 9th Computational Fluid Dynamics Conference, 1989.
- [6] R. D. Rauch, J. T. Batira, N. T. Y. Yang. Spatial Adaption Procedures on Unstructured Meshes for Accurate Unsteady Aerodynamic Flow Computations[C]. Technical Report AIAA-91-1106, 1991.
- [7] Venkatakrisnan V. On the accuracy of limiters and convergence to steady state solutions[C]. AIAA, 1993.
- [8] Wang Z J. A fast nested multi-grid viscous flow solver for adaptive Cartesian/Quad grids[J]. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 2000, 33(5): 657-680.
- [9] Versteeg H K. An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method. (Second Edition)
- [10] Ferziger J H. Computational Methods for Fluid Dynamics. (Third Edition)
- [11] Moukalled F. The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics: An Advanced Introduction with OpenFOAM and Matlab.

八、应力与应变

8.1 应力

对于一具有确定外法向方向的微面，我们将该微面受到的合力 ΔF 比上该微面的面积 ΔS ，即可得作用于该微面的全应力 \bar{S} 。将 \bar{S} 分别在微面的法向和切向进行分解，即可得作用于该微面的正应力 σ 和切应力 τ 。与流体力学中的剪切应力张量类似，我们采用应力张量 σ_{ij} （二阶张量）来描述固体材料内部某点的受力状态^[1]：

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_z \end{bmatrix} \quad [8.1.1]$$

某点的应力张量 σ_{ij} 的九个分量代表的是通过该点的三个互相垂直的平面所受到的正应力和切应力。应力张量各分量的方向服从下面的规则（图 8.1.1）：

- 1) 每个应力分量均有两个下标。第一个下标表示应力作用面法线的方向，第二个下标表示该应力的作用方向。有时也可省略正应力的第二个下标。
- 2) 如果某一截面上的外法线方向是沿着坐标轴的正向，则作用在这个截面上的应力分量就以沿着坐标轴正方向为正，沿坐标轴负方向为负。
- 3) 如果某一截面上的外法线方向是沿着坐标轴的负向，则作用在这个截面上的应力分量就以沿着坐标轴负方向为正，沿坐标轴正方向为负。

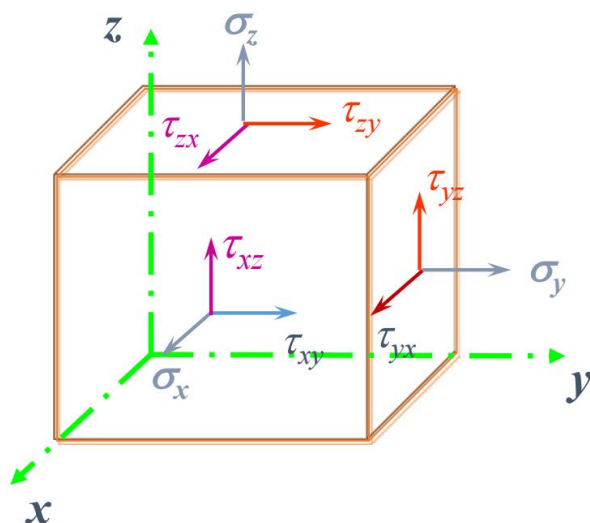


图 8.1.1 某点的应力状态

若此时处于**静力平衡状态**，绕各轴的合力矩为零，即可得应力张量 σ_{ij} 应为对称张量，即所谓的**切应力互等定律**，于是，描述点的应力状态只需要六个应力分量：

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \bullet & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \bullet & \bullet & \sigma_z \end{bmatrix} \quad [8.1.2]$$

如果我们已知某点的应力张量 σ_{ij} ，想知道通过该点任意一截面的全应力 \bar{S} ，计算方法为（ l_i 为该截面的外法向量与三个坐标轴 x_i 的夹角余弦值）：

$$\bar{S} = S_i = \sigma_{ij} l_j = \begin{bmatrix} \sigma_x l_x + \tau_{yx} l_y + \tau_{zx} l_z \\ \tau_{xy} l_x + \sigma_y l_y + \tau_{zy} l_z \\ \tau_{xz} l_x + \tau_{yz} l_y + \sigma_z l_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_x l + \tau_{yx} m + \tau_{zx} n \\ \tau_{xy} l + \sigma_y m + \tau_{zy} n \\ \tau_{xz} l + \tau_{yz} m + \sigma_z n \end{bmatrix} \quad [8.1.3]$$

进而可得作用于该截面的**正应力** σ_s 和**切应力** τ_s 为：

$$\sigma_s = \sigma_{ij} l_i l_j \quad [8.1.4]$$

$$\tau_s^2 = |\bar{S}|^2 - \sigma_s^2 \quad [8.1.5]$$

由此可见，即使材料的受力状态不变，选取的截面不同，作用于该截面的正应力和切应力可能会发生变化（图 8.1.2）；选取的坐标系不同，应力张量 σ_{ij} 中的各分量可能也会发生变化。

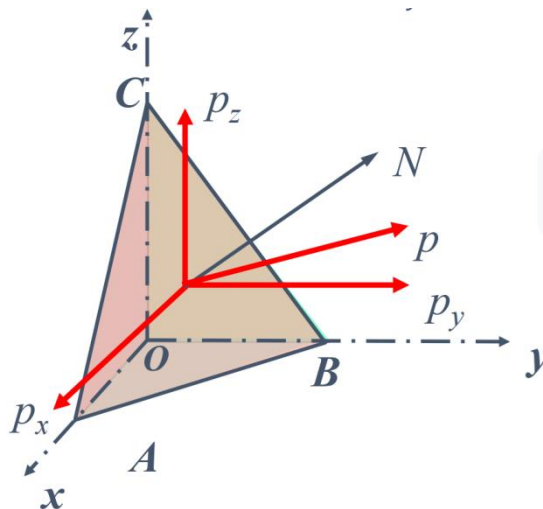


图 8.1.2 斜面上的应力

由于二阶对称张量存在三个**主轴**和三个**主值**，即当某点的应力状态确定后，我们可以找到通过该点的三个互相垂直的截面，这三个截面的应力均只有正应力，

没有切应力。于是，我们称这三个截面为**主平面**，主平面上的正应力为**主应力**，主平面的外法线方向为**主应力方向**或**应力主轴**。如果我们已知某个坐标系下的应力张量 σ_{ij} ，三个主应力 σ_N 可以视为求解系数为应力张量不变量的一元三次方程：

$$\sigma_N^3 - I_1\sigma_N^2 - I_2\sigma_N - I_3 = 0 \quad [8.1.6]$$

应力张量不变量的求法可以参见式[0.9.1]~式[0.9.3]。求得三个主应力 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ 之后，代入下面的方程组，即可得到各主应力所对应的截面方向：

$$\begin{cases} (\sigma_x - \sigma_N)l + \tau_{yx}m + \tau_{zx}n = 0 \\ \tau_{xy}l + (\sigma_y - \sigma_N)m + \tau_{zy}n = 0 \\ \tau_{xz}l + \tau_{yz}m + (\sigma_z - \sigma_N)n = 0 \end{cases} \quad [8.1.7]$$

当采用应力主轴作为坐标系方向时，通过该点任意一截面的全应力 \bar{S} 与三个主应力 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ 满足下列关系：

$$\frac{S_1^2}{\sigma_1^2} + \frac{S_2^2}{\sigma_2^2} + \frac{S_3^2}{\sigma_3^2} = 0 \quad [8.1.8]$$

此时意味着我们可以采用一个椭球来描述通过该点任意一截面的全应力 \bar{S} ，即如果以三个主应力 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ 画一个椭球， \bar{S} 的端点一定会落在椭球面上，我们称这个椭球面为**应力椭球面**（图 8.1.3）。

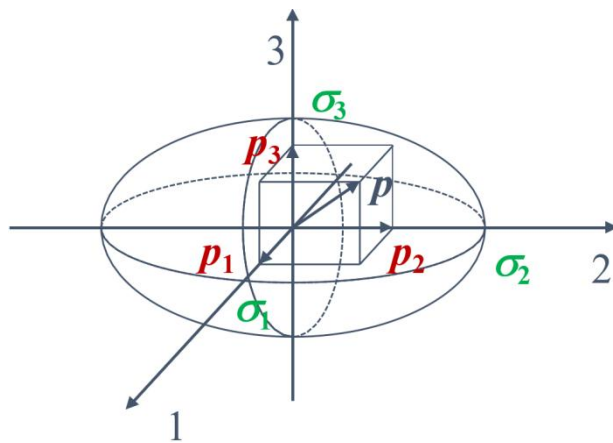


图 8.1.3 应力椭球面

对于一给定的受力状态，我们称切应力有极值的平面为**主切应力平面**，该切应力被称为**主切应力**。需要说明的是，主切应力平面上的正应力不一定为零。在主轴空间中，垂直一个主平面而与另两个主平面夹角为 45° 的平面就是主切应力平面，故主切应力平面有六个（图 8.1.4）。主切应力平面上的正应力和主切

应力可以通过三个主应力 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ 求得:

$$\sigma_{23} = \frac{\sigma_2 + \sigma_3}{2}, \sigma_{13} = \frac{\sigma_1 + \sigma_3}{2}, \sigma_{12} = \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2} \quad [8.1.9]$$

$$\tau_{23} = \pm \frac{\sigma_2 - \sigma_3}{2}, \tau_{13} = \pm \frac{\sigma_3 - \sigma_1}{2}, \tau_{12} = \pm \frac{\sigma_1 - \sigma_2}{2} \quad [8.1.10]$$

式中, 下角标 23、13、12 分别代表与主平面 1、2、3 垂直, 与主平面(2,3)、(1,3)、(1,2)成 45° 的主切应力平面。

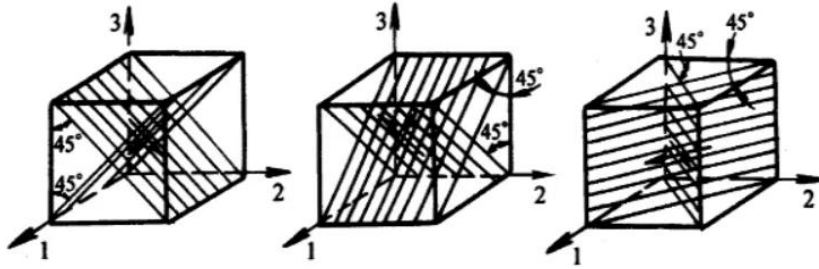


图 8.1.4 主切应力平面

如果已知 $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \sigma_3$, 我们可得最大切应力为:

$$\tau_{\max} = \frac{\sigma_1 - \sigma_3}{2} \quad [8.1.11]$$

由于单位体积的改变与应力张量 σ_{ij} 的第一不变量有关:

$$\theta = \frac{1-2\nu}{E}(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) = \frac{1-2\nu}{E} I_1 \quad [8.1.12]$$

式中, θ 为体积变化率; ν 为泊松比; E 为弹性模量。

我们设 $\sigma_m = \frac{1}{3}(\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z) = \frac{1}{3} I_1 = \frac{1}{3}(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)$ 为平均应力或静水压力(与流体力学中的压强相当), 进而可以将应力张量处理为两部分之和:

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_x - \sigma_m & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_y - \sigma_m & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_z - \sigma_m \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \sigma_m & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_m & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_m \end{bmatrix} \quad [8.1.13]$$

式[8.1.13]右端的第二项表示一种球应力状态, 称之为**应力球张量**。当质点处于球应力状态下时, 过该点的任意方向均为主方向, 且各方向的主应力相等, 而任何切面上都没有切应力。可见, **应力球张量只能引起物体的体积变化, 而无法使物体发生变形**。式[8.1.13]右端的第一项被称为**应力偏张量**, 由于应力偏张量的第一不变量为零, 可见, **应力偏张量不会引起物体体积的变化**。同时, 由于应力偏张量保留了原始应力张量的所有切应力分量, 所以**应力偏张量完全包括了应力张量作用下的形状变化因素**。应力偏张量同样有三个不变量 I'_1, I'_2, I'_3 , 当我们采用主应力形式来描述应力张量时, 应力偏张量的三个不变量可由下式计算:

$$I_1' = 0 \quad [8.1.14]$$

$$I_2' = \frac{1}{6} [(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_1 - \sigma_3)^2] \quad [8.1.15]$$

$$I_3' = (\sigma_1 - \sigma_m)(\sigma_2 - \sigma_m)(\sigma_3 - \sigma_m) \quad [8.1.16]$$

当我们通过与三个坐标轴等倾角的平面构造出一个八面体时（图 8.1.5），我们计算这个八面体各边界的正应力 σ_8 与切应力 τ_8 ，发现 σ_8 就是平均应力 σ_m ， τ_8 可由应力偏张量的第二不变量 I_2' 确定，进而在 τ_8 的基础上提出了等效应力 $\bar{\sigma}$ 的概念，其也被称为广义应力或应力强度：

$$\bar{\sigma} = \frac{3}{\sqrt{2}} \tau_8 = \frac{3}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{2}{3}} I_2' = \sqrt{3I_2'}$$

$$= \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{2} [(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_1 - \sigma_3)^2]} & \text{(主轴坐标系)} \\ \sqrt{\frac{1}{2} [(\sigma_x - \sigma_y)^2 + (\sigma_y - \sigma_z)^2 + (\sigma_x - \sigma_z)^2 + 6(\tau_{xy}^2 + \tau_{yz}^2 + \tau_{xz}^2)]} & \text{(任意坐标系)} \end{cases} \quad [8.1.17]$$

等效应力可以在一定意义上“代表”整个应力状态中的偏张量部分，它与塑性变形关系很密切。我们可以借助等效应力的变化来判断加载、中性载荷和卸载。

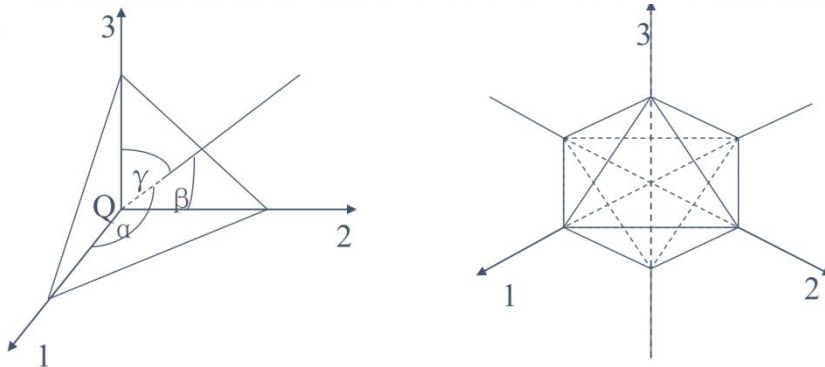


图 8.1.5 八面体平面

应力莫尔圆与应力椭球面都是应力状态的一种几何表达。**应力莫尔圆**的几何画法为：先确定三个主应力 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ ；然后建立横坐标为正应力，纵坐标为切应力的直角坐标系；接着在横坐标上确定 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ 的位置，分别取两个点为直径端点画圆，得到三个莫尔圆；最后，不同截面上的正应力和切应力就分布在三个莫尔圆围成的阴影部分（图 8.1.6）。如果确定了阴影里面的一点 P，其坐标就是该截面的正应力和切应力，之后可以求得该截面的法向方向。

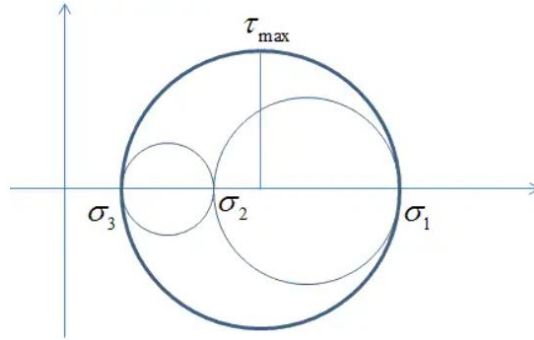


图 8.1.6 应力莫尔圆

8.2 应变

与应力状态相类似，我们也需要描述点的应变状态^[1]。应变状态分析的最主要目标是建立应变及应变速率的几何方程，并为描述应力与应变关系做准备。从定义上来看，描述应变的方法有工程应变 ε 和对数应变 ε^* ：

$$\varepsilon = \frac{l - l_0}{l_0} \quad [8.2.1]$$

$$\varepsilon^* = \int_{l_0}^l \frac{dl}{l} = \ln \frac{l}{l_0} \quad [8.2.2]$$

关于工程应变与对数应变，有以下几点需要了解：

- 1) 工程应变又被称为**相对应变**、**条件应变**，对数应变又被称为**自然应变**、**真实应变**。对于微小应变，用这两种度量求出来的应变值几乎是一样的。
- 2) 工程应变不能表示变形的真实情况，而且变形程度越大，误差也越大。
- 3) 对数应变为**可加应变**，工程应变为**不可加应变**。
- 4) 对数应变为**可比应变**，工程应变为**不可比应变**。

我们采用应变张量 ε_{ij} 来描述应变状态， ε_{ij} 与位移场 u_i 相关。这里需要说明的是，我们在流体力学中， ε_{ij} 代表剪切速率张量， u_i 代表速度矢量，而在这里， ε_{ij} 代表应变张量， u_i 代表位移矢量， $\dot{\varepsilon}_{ij}$ 代表应变速率张量， \dot{u}_i 代表速度矢量。应变可分为**正应变（线应变）**和**切应力**，正应变又可分为**拉应变**和**压应变**。正应变以线元长度的相对变化来表示，而切应变以相互垂直线元之间的角度变化来表示。应变用位移的相对变化表示，这纯粹是几何学的问题，所以**应变分析不论对弹性问题还是塑性问题均适用**。

在小变形条件下，微元体的**应变张量** ε_{ij} 为：

$$\varepsilon_{ij} = \begin{bmatrix} \varepsilon_x & \gamma_{xy} & \gamma_{xz} \\ \gamma_{yx} & \varepsilon_y & \gamma_{yz} \\ \gamma_{zx} & \gamma_{zy} & \varepsilon_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon_x & \gamma_{xy} & \gamma_{xz} \\ \bullet & \varepsilon_y & \gamma_{yz} \\ \bullet & \bullet & \varepsilon_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}\right) \\ \bullet & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z}\right) \\ \bullet & \bullet & \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix} \quad [8.2.3]$$

式[8.2.3]被称为**小变形几何方程**（柯西方程）。如果变形体内的位移场已知，则可由柯西方程求得各质点的应变状态，再根据应力应变关系（本构关系）求得应力状态。需要说明的是，应变分析是针对小变形而言的，但其可以推广用于**大变形**。因为大变形是由小变形积累而成的，若将大塑性变形过程分成若干个很小的变形阶段，则每个阶段的变形仍可看成是小变形。

与应力张量类似，应变张量也可以有**主应变**、**应变主轴**、**应变张量不变量**、**主切应变**、**最大切应变**、**应变球张量**、**应变偏张量**、**等效应变**等概念。其中，最大切应变与最大、最小主应变有关，应变球张量表示单元体的体积变化，应变偏张量表示单元体的形状变化，等效应变（广义应变、应变强度）由应变偏张量的第二不变量确定。如果认为塑性变形时体积不变，即 $\varepsilon_m = 0$ ，此时应变球张量为 0，应变张量就是应变偏张量。

$$\gamma_{\max} = \pm \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{2} \quad [8.2.4]$$

$$\varepsilon_m = \frac{1}{3}(\varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z) = \frac{1}{3}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3) = \frac{1}{3}I_1 \quad [8.2.5]$$

$$\varepsilon_{ij} = \begin{bmatrix} \varepsilon_x & \gamma_{xy} & \gamma_{xz} \\ \gamma_{yx} & \varepsilon_y & \gamma_{yz} \\ \gamma_{zx} & \gamma_{zy} & \varepsilon_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon_x - \varepsilon_m & \gamma_{xy} & \gamma_{xz} \\ \gamma_{yx} & \varepsilon_y - \varepsilon_m & \gamma_{yz} \\ \gamma_{zx} & \gamma_{zy} & \varepsilon_z - \varepsilon_m \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_m & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_m & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_m \end{bmatrix} \quad [8.2.6]$$

$$\bar{\varepsilon} = \sqrt{2}\gamma_8 = \sqrt{2}\sqrt{\frac{2}{3}I_2'} = \sqrt{\frac{4}{3}I_2'}$$

$$= \begin{cases} \frac{\sqrt{2}}{3}\sqrt{[(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + (\varepsilon_2 - \varepsilon_3)^2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_3)^2]} & \text{(主轴坐标系)} \\ \frac{\sqrt{2}}{3}\sqrt{(\varepsilon_x - \varepsilon_y)^2 + (\varepsilon_y - \varepsilon_z)^2 + (\varepsilon_x - \varepsilon_z)^2 + 6(\gamma_{xy}^2 + \gamma_{yz}^2 + \gamma_{xz}^2)} & \text{(任意坐标系)} \end{cases} \quad [8.2.7]$$

以上所提及的应变通常被称为**全量应变**，即该应变代表了全过程的应变量。如果质点曾有过几次变形，则其全量应变将是历次变形叠加的结果。但对于塑性成形而言，涉及到塑性加载、卸载时，应力与应变无法保证一一对应。于是我们将应变限制在一个非常小的范围内，在该范围内的应变就与该瞬时的应力状态相对应，我们称之为**应变增量** $d\varepsilon$ ，进而有所谓的应变增量张量 $d\varepsilon_{ij}$ 。应变增量 $d\varepsilon$ 与位移增量 du 的关系为：

$$\begin{aligned}
d\varepsilon_{ij} &= \begin{bmatrix} d\varepsilon_x & d\gamma_{xy} & d\gamma_{xz} \\ d\gamma_{yx} & d\varepsilon_y & d\gamma_{yz} \\ d\gamma_{zx} & d\gamma_{zy} & d\varepsilon_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d\varepsilon_x & d\gamma_{xy} & d\gamma_{xz} \\ \bullet & d\varepsilon_y & d\gamma_{yz} \\ \bullet & \bullet & \varepsilon_z \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \frac{\partial(du)}{\partial x} & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial(du)}{\partial y} + \frac{\partial(dv)}{\partial x}\right) & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial(du)}{\partial z} + \frac{\partial(dw)}{\partial x}\right) \\ \bullet & \frac{\partial(dv)}{\partial y} & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial(dw)}{\partial y} + \frac{\partial(dv)}{\partial z}\right) \\ \bullet & \bullet & \frac{\partial(dw)}{\partial z} \end{bmatrix} \quad [8.2.8]
\end{aligned}$$

需要说明的是，应变增量张量 $d\varepsilon_{ij}$ 不是应变张量 ε_{ij} 的微分，即 $\varepsilon_{ij} \neq \int d\varepsilon_{ij}$ 。这个也好理解，实际物体的变形过程是十分复杂的，变形往往不均匀，应变主轴不断变化，使得应变增量张量的主轴与应变张量的主轴不一定重合。事实上，把应变增量张量理解为很小的应变张量就足够了，应变增量与全量应变除了计算的起点以及计算过程的长度不同之外，两者没有其他不同之处。

当材料的力学性能（或本构关系）与变形速度有关时，我们就需要使用应变速率张量 $\dot{\varepsilon}_{ij}$ 来描述材料的变形状态。应变速率张量 $\dot{\varepsilon}_{ij}$ 可以视为是应变增量张量 $d\varepsilon_{ij}$ 对时间增量 dt 的比值，但应变速率张量 $\dot{\varepsilon}_{ij}$ 不是应变张量 ε_{ij} 对时间的导数。

$$\begin{aligned}
\dot{\varepsilon}_{ij} &= \begin{bmatrix} \dot{\varepsilon}_x & \dot{\gamma}_{xy} & \dot{\gamma}_{xz} \\ \dot{\gamma}_{yx} & \dot{\varepsilon}_y & \dot{\gamma}_{yz} \\ \dot{\gamma}_{zx} & \dot{\gamma}_{zy} & \dot{\varepsilon}_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dot{\varepsilon}_x & \dot{\gamma}_{xy} & \dot{\gamma}_{xz} \\ \bullet & \dot{\varepsilon}_y & \dot{\gamma}_{yz} \\ \bullet & \bullet & \dot{\varepsilon}_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \dot{u}}{\partial x} & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \dot{u}}{\partial y} + \frac{\partial \dot{v}}{\partial x}\right) & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \dot{u}}{\partial z} + \frac{\partial \dot{w}}{\partial x}\right) \\ \bullet & \frac{\partial \dot{v}}{\partial y} & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \dot{w}}{\partial y} + \frac{\partial \dot{v}}{\partial z}\right) \\ \bullet & \bullet & \frac{\partial \dot{w}}{\partial z} \end{bmatrix} \quad [8.2.9]
\end{aligned}$$

综上所述，我们三个张量来描述应变状态：应变张量 ε_{ij} 、应变增量张量 $d\varepsilon_{ij}$ 、应变速率张量 $\dot{\varepsilon}_{ij}$ 。关于这三个张量，以下几点需要清楚：

- 1) 应变张量描述的是过程（整体）变形状态，应变增量张量与应变速率张量描述的是瞬时变形状态。
- 2) 解决弹性和小塑性变形问题时主要用全量应变（应变张量），而解决塑性成形问题（大变形问题）时主要采用应变增量或应变速率。
- 3) 如果不考虑变形速度对材料性能的影响，则用应变增量和应变速率计算出来的结果应该是一致的。
- 4) 将大塑性变形过程分成若干个很小的变形阶段，则每个阶段的变形仍可看成是小变形。

8.3 等效应力-等效应变曲线的简化模型

试验表明，按不同应力组合所得到的等效应力-等效应变曲线^[2,3] ($\bar{\sigma}$ - $\bar{\epsilon}$ 曲线) 与简单拉伸时的应力-应变曲线基本相同。于是，我们可以假设，对于同一种材料，在变形条件相同的情形下，等效应力与等效应变曲线是单一的，称为**单一曲线假设**。

单向拉伸时的名义应力-应变曲线以及不同的变形阶段如下图所示（图 8.3.1、图 8.3.2）：

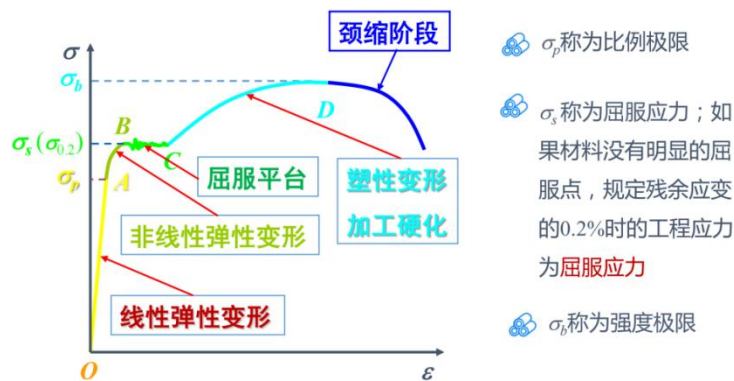


图 8.3.1 单向拉伸时的名义应力-应变曲线

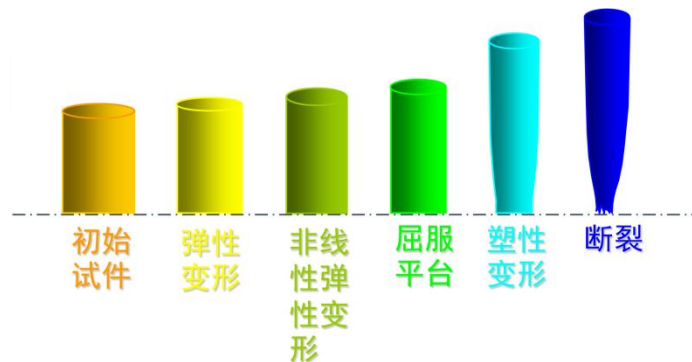


图 8.3.2 单向拉伸时的不同变形阶段

可以将名义应力-应变曲线处理为真应力-真应变曲线（图 8.3.3）：

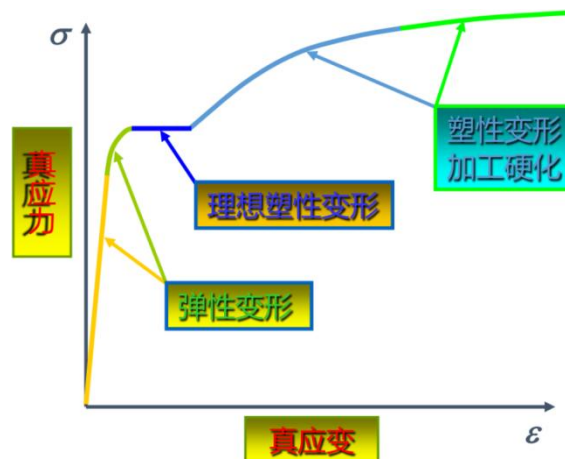


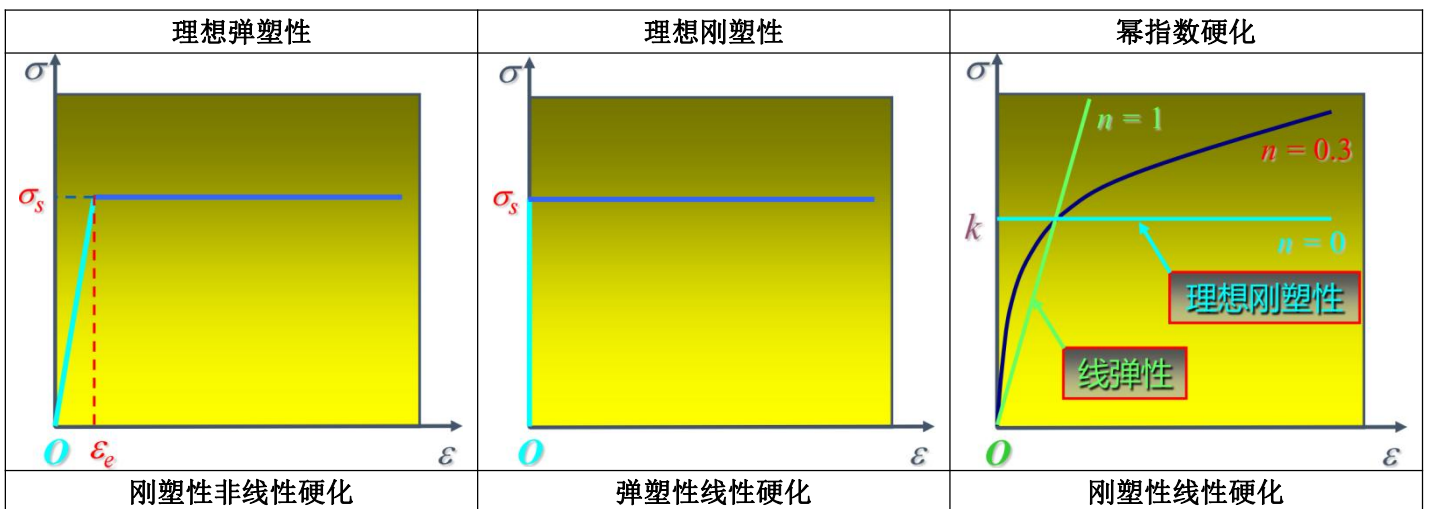
图 8.3.3 真应力-真应变曲线

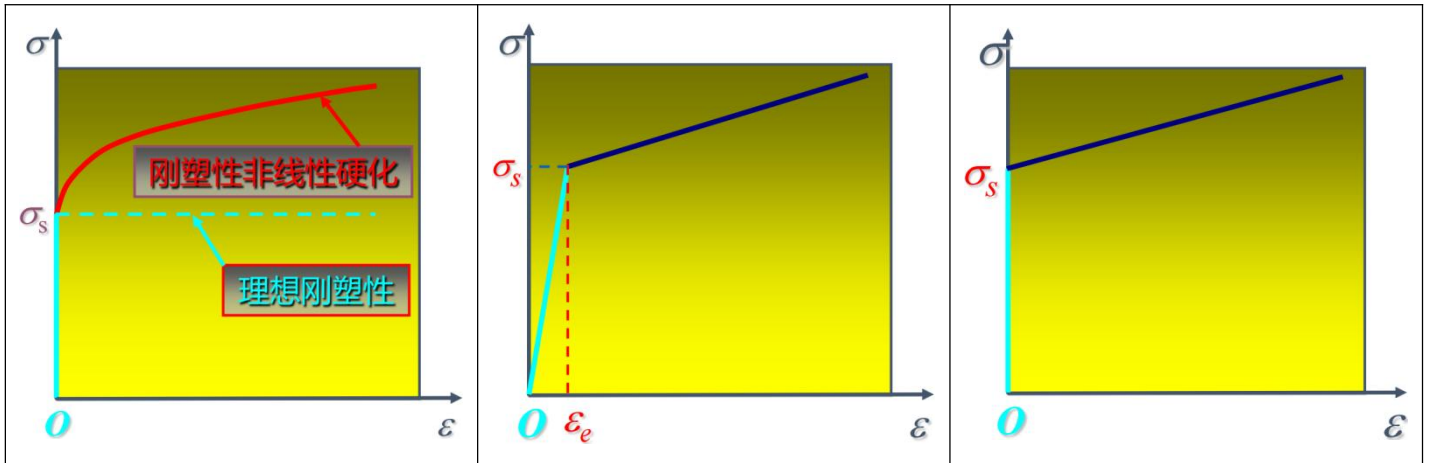
由于实验方法获取的 $\bar{\sigma}$ - $\bar{\varepsilon}$ 曲线（真应力-真应变曲线）一般较为复杂，不能用简单的函数形式描述，所以通常将其简化为以下几种模型（表 8.3.1、表 8.3.2）。

表 8.3.1 各种简化的材料模型

| 材料模型 | 数学表达式 | |
|--|--|---------|
| 理想弹性性 适合于应变不太大，强化程度较小的材料 | $\begin{cases} \bar{\sigma} = E\bar{\varepsilon} & \bar{\varepsilon} \leq \varepsilon_e \\ \bar{\sigma} = \sigma_s = E\varepsilon_e & \bar{\varepsilon} > \varepsilon_e \end{cases}$ | [8.3.1] |
| 理想刚塑性性 适合于热加工和超塑性的金属材料 | $\bar{\sigma} = \sigma_s$ | [8.3.2] |
| 幂指数硬化 适合于大多数金属材料，可简化为线弹性模型和理想刚塑性模型 | $\bar{\sigma} = A\bar{\varepsilon}^n$ | [8.3.3] |
| 刚塑性非线性硬化 适合于预先经过冷加工的金属材料 | $\bar{\sigma} = \sigma_s + A\bar{\varepsilon}^m$ | [8.3.4] |
| 弹塑性线性硬化 适合于弹性变形不可忽略，且塑性变形的硬化率接近于不变的材料 | $\begin{cases} \bar{\sigma} = E\bar{\varepsilon} & \bar{\varepsilon} \leq \varepsilon_e \\ \bar{\sigma} = \sigma_s + E'(\bar{\varepsilon} - \varepsilon_e) = E\varepsilon_e + E'(\bar{\varepsilon} - \varepsilon_e) & \bar{\varepsilon} > \varepsilon_e \end{cases}$ | [8.3.5] |
| 刚塑性线性硬化 适合于经过较大的冷变形量之后，并且其加工硬化率几乎不变的材料 | $\bar{\sigma} = \sigma_s + A_2\bar{\varepsilon}$ | [8.3.6] |

表 8.3.2 各种简化模型的曲线





参考资料:

- [1] 吴树森. 材料成形原理(第3版). p.276-p.305.
- [2] 吴树森. 材料成形原理(第3版). p.323-p.324.
- [3] 图片来源于“黄亮. 材料成形理论基础”.

Copyright by Liu CAO (曹流)

九、（热）弹性/弹塑性力学控制方程

9.1 应力平衡微分方程

与流体力学中的受力分析类似，我们这里也指定一个微六面体，并认为对应面的应力分量满足线性关系（图 9.1.1）。当该微六面体处于静力平衡状态，依据力的平衡关系可得应力平衡微分方程^[1]：

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} + f_i = \begin{bmatrix} \frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + f_x \\ \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_y}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + f_y \\ \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_z}{\partial z} + f_z \end{bmatrix} = 0 \quad [9.1.1]$$

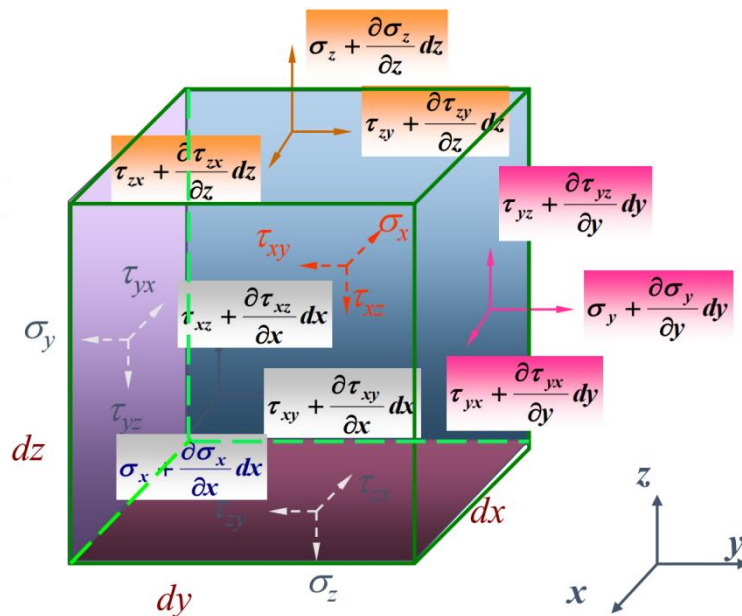


图 9.1.1 微六面体的应力状态

9.2 柯西方程

柯西方程^[1]用于描述小变形情形下位移场 u_i 与应变张量 ε_{ij} 之间的关系，本质上是一种几何关系，此时也被称为小变形几何方程。

$$\varepsilon_{ij} = \begin{bmatrix} \varepsilon_x & \gamma_{xy} & \gamma_{xz} \\ \gamma_{yx} & \varepsilon_y & \gamma_{yz} \\ \gamma_{zx} & \gamma_{zy} & \varepsilon_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon_x & \gamma_{xy} & \gamma_{xz} \\ \bullet & \varepsilon_y & \gamma_{yz} \\ \bullet & \bullet & \varepsilon_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\ \bullet & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \\ \bullet & \bullet & \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix} \quad [9.2.1]$$

对于大变形情形，我们需要描述位移增量场 du_i 与应变增量张量 $d\varepsilon_{ij}$ 之间的关系，或者是描述速度场 \dot{u}_i 与应变速率张量 $\dot{\varepsilon}_{ij}$ 之间的关系：

$$d\varepsilon_{ij} = \begin{bmatrix} d\varepsilon_x & d\gamma_{xy} & d\gamma_{xz} \\ d\gamma_{yx} & d\varepsilon_y & d\gamma_{yz} \\ d\gamma_{zx} & d\gamma_{zy} & d\varepsilon_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d\varepsilon_x & d\gamma_{xy} & d\gamma_{xz} \\ \bullet & d\varepsilon_y & d\gamma_{yz} \\ \bullet & \bullet & \varepsilon_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial(du)}{\partial x} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial(du)}{\partial y} + \frac{\partial(dv)}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial(du)}{\partial z} + \frac{\partial(dw)}{\partial x} \right) \\ \bullet & \frac{\partial(dv)}{\partial y} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial(dw)}{\partial y} + \frac{\partial(dv)}{\partial z} \right) \\ \bullet & \bullet & \frac{\partial(dw)}{\partial z} \end{bmatrix} \quad [9.2.2]$$

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \begin{bmatrix} \dot{\varepsilon}_x & \dot{\gamma}_{xy} & \dot{\gamma}_{xz} \\ \dot{\gamma}_{yx} & \dot{\varepsilon}_y & \dot{\gamma}_{yz} \\ \dot{\gamma}_{zx} & \dot{\gamma}_{zy} & \dot{\varepsilon}_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dot{\varepsilon}_x & \dot{\gamma}_{xy} & \dot{\gamma}_{xz} \\ \bullet & \dot{\varepsilon}_y & \dot{\gamma}_{yz} \\ \bullet & \bullet & \dot{\varepsilon}_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \dot{u}}{\partial x} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \dot{u}}{\partial y} + \frac{\partial \dot{v}}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \dot{u}}{\partial z} + \frac{\partial \dot{w}}{\partial x} \right) \\ \bullet & \frac{\partial \dot{v}}{\partial y} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \dot{w}}{\partial y} + \frac{\partial \dot{v}}{\partial z} \right) \\ \bullet & \bullet & \frac{\partial \dot{w}}{\partial z} \end{bmatrix} \quad [9.2.3]$$

9.3 应变协调方程

从数学角度来看，应变协调方程或应变连续方程^[1]是对柯西方程中的应变分量进行偏导运算，然后建立正应变与切应变之间的关系；从物理角度来看，应变协调方程是确保材料在发生变形之后仍然可以连续地组合起来。应变协调方程可以分为两组：

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \gamma_{xy}}{\partial x \partial y} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varepsilon_y}{\partial x^2} \right) \\ \frac{\partial^2 \gamma_{yz}}{\partial y \partial z} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon_y}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \varepsilon_z}{\partial y^2} \right) \\ \frac{\partial^2 \gamma_{zx}}{\partial z \partial x} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varepsilon_x}{\partial z^2} \right) \end{cases} \quad [9.3.1]$$

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \varepsilon_x}{\partial y \partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \gamma_{zx}}{\partial y} + \frac{\partial \gamma_{xy}}{\partial z} - \frac{\partial \gamma_{yz}}{\partial x} \right) \\ \frac{\partial^2 \varepsilon_y}{\partial z \partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \gamma_{xy}}{\partial z} + \frac{\partial \gamma_{yz}}{\partial x} - \frac{\partial \gamma_{zx}}{\partial y} \right) \\ \frac{\partial^2 \varepsilon_z}{\partial x \partial y} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \gamma_{yz}}{\partial x} + \frac{\partial \gamma_{zx}}{\partial y} - \frac{\partial \gamma_{xy}}{\partial z} \right) \end{cases} \quad [9.3.2]$$

需要说明的是，我们可以把柯西方程和应变协调方程结合起来看，如果我们已经通过柯西方程建立了位移场与应变张量的关系，那么可以不用考虑应变协调方程了，因为此时应变协调方程自然会满足。如果我们是通过其他方法先得到了应变分量（即获得了应变张量），那么我们需要应变张量里的各分量满足应变协调方程，才能得到正确的位移场。

9.4 弹性应力-应变关系

针对各向同性材料，广义胡克定律^[2]用于描述其在一般应力状态下的弹性应力应变关系：

$$\begin{cases} \varepsilon_x = \frac{1}{E} [\sigma_x - \nu(\sigma_y + \sigma_z)] \\ \varepsilon_y = \frac{1}{E} [\sigma_y - \nu(\sigma_x + \sigma_z)] \\ \varepsilon_z = \frac{1}{E} [\sigma_z - \nu(\sigma_x + \sigma_y)] \\ \gamma_{xy} = \frac{\tau_{xy}}{2G} \\ \gamma_{yz} = \frac{\tau_{yz}}{2G} \\ \gamma_{zx} = \frac{\tau_{zx}}{2G} \end{cases} \quad [9.4.1]$$

写成张量形式为：

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2G} \sigma'_{ij} + \frac{1-2\nu}{E} \sigma_m \delta_{ij} \quad [9.4.2]$$

式中， E 为弹性模量， ν 为泊松比， $G = \frac{E}{2(1+\nu)}$ 为切变模量， δ_{ij} 为克氏符号。

也可将式[9.4.1]改写为：

$$\begin{cases} \sigma_x = 2G\varepsilon_x + \lambda\theta \\ \sigma_y = 2G\varepsilon_y + \lambda\theta \\ \sigma_z = 2G\varepsilon_z + \lambda\theta \\ \tau_{xy} = 2G\gamma_{xy} \\ \tau_{yz} = 2G\gamma_{yz} \\ \tau_{zx} = 2G\gamma_{zx} \end{cases} \quad [9.4.3]$$

式中， $\lambda = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)}$ 为拉梅系数， $\theta = \varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z$ 为体积应变。

将式[9.4.3]可以写为张量形式：

$$\sigma_{ij} = D_{ijkl}^e \varepsilon_{kl} \quad [9.4.4]$$

式中， D_{ijkl}^e 为弹性本构四阶张量。借助 Voigt 标记方法，我们可以将式[9.4.4]写成矩阵与向量的形式：

$$\sigma = D^e \varepsilon \quad [9.4.5]$$

$$\sigma = [\sigma_{11} \quad \sigma_{22} \quad \sigma_{33} \quad \sigma_{12} \quad \sigma_{23} \quad \sigma_{31}]^T = [\sigma_x \quad \sigma_y \quad \sigma_z \quad \tau_{xy} \quad \tau_{yz} \quad \tau_{zx}]^T \quad [9.4.6]$$

$$\varepsilon = [\varepsilon_{11} \quad \varepsilon_{22} \quad \varepsilon_{33} \quad \varepsilon_{12} \quad \varepsilon_{23} \quad \varepsilon_{31}]^T = [\varepsilon_x \quad \varepsilon_y \quad \varepsilon_z \quad \gamma_{xy} \quad \gamma_{yz} \quad \gamma_{zx}]^T \quad [9.4.7]$$

$$D^e = \begin{bmatrix} 2G + \lambda & \lambda & \lambda & & & \\ \lambda & 2G + \lambda & \lambda & & & \\ \lambda & \lambda & 2G + \lambda & & & \\ & & & 2G & & \\ & & & & 2G & \\ & & & & & 2G \end{bmatrix} \quad [9.4.8]$$

9.5 热弹性应力-应变关系

热弹性模型^[3]中，认为应变由两部分组成：**弹性应变** ε_e 和**热应变** ε_T 。其中，弹性应变 ε_e 采用广义胡克定律进行描述，热应变 ε_T 与**热膨胀系数** α 和**温差** ΔT 有关（ $\varepsilon_T = \alpha\Delta T$ ）。由于热膨胀只会影响体积膨胀或收缩，不会引起材料的变形，

所以热应变 ε_T 只会影响应变张量的对角线元素。

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_x = \frac{1}{E} [\sigma_x - \nu(\sigma_y + \sigma_z)] + \alpha\Delta T \\ \varepsilon_y = \frac{1}{E} [\sigma_y - \nu(\sigma_x + \sigma_z)] + \alpha\Delta T \\ \varepsilon_z = \frac{1}{E} [\sigma_z - \nu(\sigma_x + \sigma_y)] + \alpha\Delta T \\ \gamma_{xy} = \frac{\tau_{xy}}{2G} \\ \gamma_{yz} = \frac{\tau_{yz}}{2G} \\ \gamma_{zx} = \frac{\tau_{zx}}{2G} \end{array} \right. \quad [9.5.1]$$

也可将式[9.5.1]改写为:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_x = 2G\varepsilon_x + \lambda\theta - \frac{E}{1-2\nu}\alpha\Delta T \\ \sigma_y = 2G\varepsilon_y + \lambda\theta - \frac{E}{1-2\nu}\alpha\Delta T \\ \sigma_z = 2G\varepsilon_z + \lambda\theta - \frac{E}{1-2\nu}\alpha\Delta T \\ \tau_{xy} = 2G\gamma_{xy} \\ \tau_{yz} = 2G\gamma_{yz} \\ \tau_{zx} = 2G\gamma_{zx} \end{array} \right. \quad [9.5.2]$$

将式[9.5.2]可以写为张量形式:

$$\sigma_{ij} = D_{ijkl}^e \varepsilon_{kl} - \frac{E}{1-2\nu} \alpha\Delta T \delta_{ij} \quad [9.5.3]$$

式中, D_{ijkl}^e 为弹性本构四阶张量。借助 Voigt 标记方法, 我们可以将式[9.5.3]写成矩阵与向量的形式:

$$\sigma = D^e \varepsilon + \sigma_T = D^e (\varepsilon - \varepsilon_T) \quad [9.5.4]$$

$$\sigma = [\sigma_{11} \quad \sigma_{22} \quad \sigma_{33} \quad \sigma_{12} \quad \sigma_{23} \quad \sigma_{31}]^T = [\sigma_x \quad \sigma_y \quad \sigma_z \quad \tau_{xy} \quad \tau_{yz} \quad \tau_{zx}]^T \quad [9.5.5]$$

$$\varepsilon = [\varepsilon_{11} \quad \varepsilon_{22} \quad \varepsilon_{33} \quad \varepsilon_{12} \quad \varepsilon_{23} \quad \varepsilon_{31}]^T = [\varepsilon_x \quad \varepsilon_y \quad \varepsilon_z \quad \gamma_{xy} \quad \gamma_{yz} \quad \gamma_{zx}]^T \quad [9.5.6]$$

$$D^e = \begin{bmatrix} 2G + \lambda & \lambda & \lambda & & & \\ \lambda & 2G + \lambda & \lambda & & & \\ \lambda & \lambda & 2G + \lambda & & & \\ & & & 2G & & \\ & & & & 2G & \\ & & & & & 2G \end{bmatrix} \quad [9.5.7]$$

$$\sigma_T = -\frac{E}{1-2\nu} \alpha \Delta T [1 \ 1 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0]^T \quad [9.5.8]$$

$$\varepsilon_T = \alpha \Delta T [1 \ 1 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0]^T \quad [9.5.9]$$

9.6 弹塑性应力-应变关系

在描述弹性应力-应变关系和热弹性应力-应变关系时，我们建立的是全量的、与加载路径无关的应力-应变关系。当材料处于塑性状态时，一方面，应力和应变之间不再是弹性状态下的线性关系，我们无法采用简单的线性模型来描述应力-应变关系，另一方面，塑性阶段的应变状态不仅与应力状态相关，而且依赖于整个加载路径。因此，我们只能建立瞬时状态下的**应力增量**与**应变增量**之间的关系，即所谓的**增量理论**^[4]，进而在时间上对应力增量和应变增量进行积分，以获得应力全量和应变全量。

基于增量理论的张量形式的**弹塑性模型**为：

$$(d\sigma)_{ij} = D_{ijkl}^{ep} (d\varepsilon)_{kl} \quad [9.6.1]$$

式中， D_{ijkl}^{ep} 为**弹塑性本构四阶张量**。

将式[9.6.1]写成矩阵和向量的形式为：

$$d\sigma = D^{ep} d\varepsilon \quad [9.6.2]$$

对应力增量 $d\sigma$ 和应变增量 $d\varepsilon$ 在时间 t 上进行积分，即可得最终的应力 σ 和应变 ε ：

$$\varepsilon = \int d\varepsilon(t) \quad [9.6.3]$$

$$\sigma = \int d\sigma(t) = \int D^{ep}(t) d\varepsilon(t) \quad [9.6.4]$$

在实际工程应用中，通常把材料的塑性非线性处理成双线性强化模型，这里采用双线性强化模型中的**双线性等向强化模型**（没有考虑鲍辛格效应，认为各个方向的屈服极限会同时上升）来描述弹塑性行为。下图为双线性等向强化模型的示意图。主要需要从以下几个方面来认识双线性等向强化模型（图 9.6.1）：

- 1) 如等效应力 $\bar{\sigma}$ 一直未超过初始屈服极限 σ_s ，那么材料将会一直处于弹性阶段，此时矩阵 D^{ep} 与 D^e （式[9.4.8]）完全相同，即模量采用**弹性模量** E ，此阶段的加载和卸载情形下的应力-应变曲线是相同的（均沿着第一段直线）；
- 2) 如等效应力 $\bar{\sigma}$ 一旦超过初始屈服极限 σ_s ，材料将进入塑性阶段，如继续加载，材料的应力-应变关系将沿第二段直线变化，此时矩阵 D^{ep} 与 D^e （式[9.4.8]）的形式是一样的，但模量需要采用**硬化模量** E_p ；
- 3) 进入塑性阶段后，如进行卸载，应力-应变关系不会沿第二段直线返回，而是以弹性模量 E 为斜率进行卸载，此时矩阵 D^{ep} 中的模量为弹性模量 E ，此情形下即使应力卸载至零，应变也不会为零，即发生了永久变形（塑性变形）；
- 4) 如接着加载，将以弹性模量 E 为斜率进行弹性变形，此时新的屈服极限就成为了 σ'_s ，即材料发生了硬化。

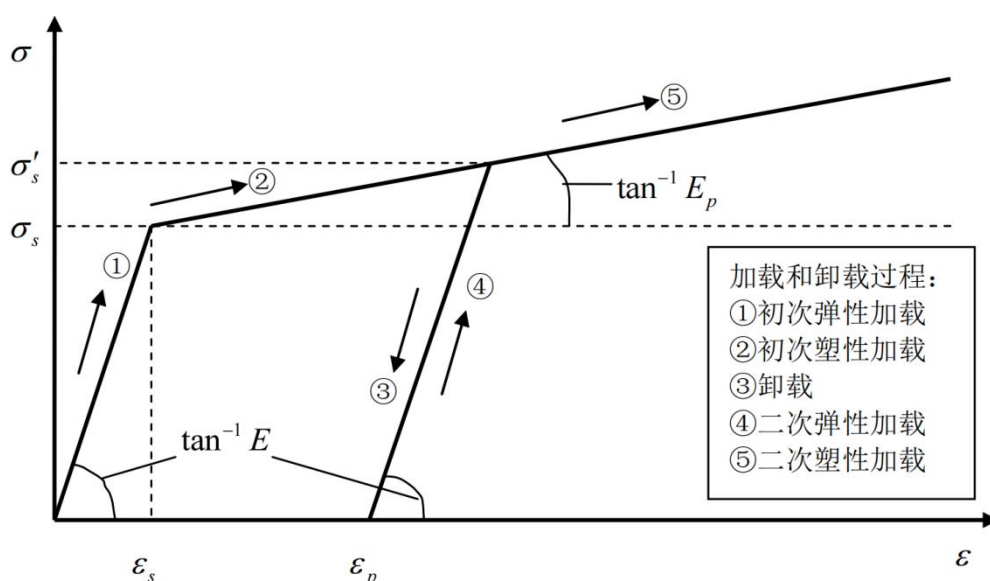


图 9.6.1 双线性等向强化模型

由上可知，弹塑性本构的复杂之处在于需要实时判断材料的载荷状态，我们采用**加载准则**来判断当前材料处于**加载**状态还是**卸载**状态：

$$\begin{cases} d\bar{\sigma} = \bar{\sigma}(t_2) - \bar{\sigma}(t_1) > 0 & \text{加载状态} \\ d\bar{\sigma} = \bar{\sigma}(t_2) - \bar{\sigma}(t_1) < 0 & \text{卸载状态} \end{cases} \quad [9.6.5]$$

依据式[9.6.5]所示的加载准则，并结合当前的等效应力以及当前的屈服极限，即可确定当前是处于弹性阶段还是塑性阶段，进而确定式[9.6.2]中的弹塑性本构矩阵：

$$D^{ep} = mD^e + (1-m)D^p \quad [9.6.6]$$

式中， m 为弹性塑性转变系数（ m 只能为 0 或 1），当 $m=1$ 时材料处于弹性阶段，当 $m=0$ 时材料处于塑性阶段； D^e 为弹性本构矩阵，模量采用弹性模量 E ； D^p 为塑性本构矩阵，模量采用硬化模量 E_p 。

9.7 热弹塑性应力-应变关系

热弹塑性应力-应变关系^[4]与弹塑性应力-应变关系的不同之处主要体现在两个方面：一是，当温度变化范围很大时，物性参数随温度变化也很大，即弹性模量 E 与硬化模量 E_p 会随温变化，图 9.7.1 给出了不同温度下的变化曲线（1→5，温度逐渐升高）；二是，热弹塑性应力-应变关系需要考虑热应变 ε_T 。

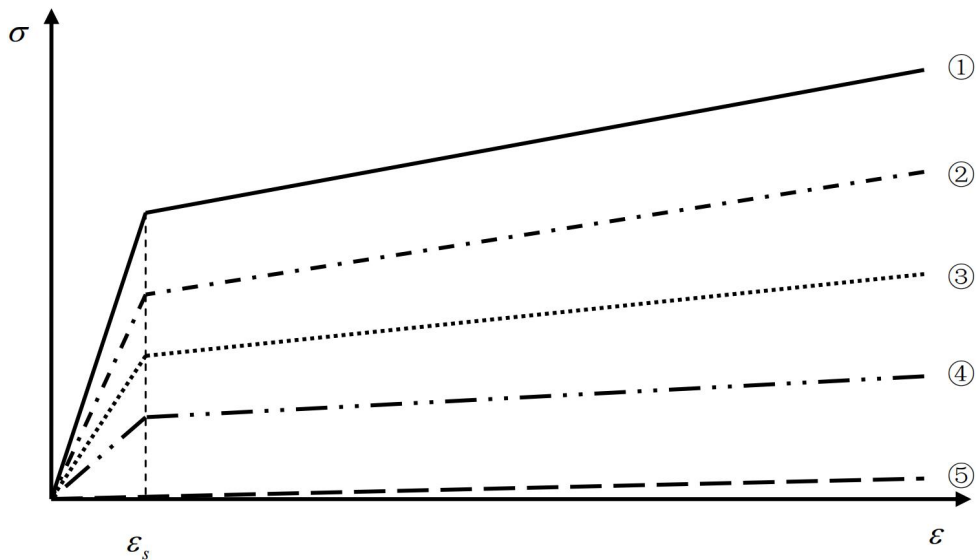


图 9.7.1 双线性等向强化模型在不同温度下的应力-应变曲线示意图

基于增量理论的张量形式的热弹塑性模型为：

$$(d\sigma)_{ij} = D_{ijkl}^{ep} [(d\varepsilon)_{kl} - (d\varepsilon_T)_{kl}] \quad [9.7.1]$$

式中， D_{ijkl}^{ep} 为弹塑性本构四阶张量。

将式[9.7.1]写成矩阵和向量的形式为：

$$d\sigma = D^{ep}(d\varepsilon - d\varepsilon_T) \quad [9.7.2]$$

$$d\varepsilon_T = \alpha d(\Delta T) [1 \ 1 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0]^T \quad [9.7.3]$$

式中， $d(\Delta T)$ 为温度增量。

对应力增量 $d\sigma$ 和应变增量 $d\varepsilon$ 在时间 t 上进行积分，即可得最终的应力 σ 和应变 ε ：

$$\varepsilon = \int d\varepsilon(t) \quad [9.7.4]$$

$$\sigma = \int d\sigma(t) = \int D^{ep}(t)d\varepsilon(t) \quad [9.7.5]$$

我们采用**加载准则**来判断当前材料处于**加载**状态还是**卸载**状态：

$$\begin{cases} d\bar{\sigma} = \bar{\sigma}(t_2) - \bar{\sigma}(t_1) > 0 & \text{加载状态} \\ d\bar{\sigma} = \bar{\sigma}(t_2) - \bar{\sigma}(t_1) < 0 & \text{卸载状态} \end{cases} \quad [9.7.6]$$

依据式[9.7.6]所示的加载准则，并结合当前的等效力以及当前的屈服极限，即可确定当前是处于弹性阶段还是塑性阶段，进而确定式[9.7.2]中的弹塑性本构矩阵：

$$D^{ep} = mD^e + (1-m)D^p \quad [9.7.7]$$

式中， m 为弹性塑性转变系数，当 $m=1$ 时材料处于弹性阶段，当 $m=0$ 时材料处于塑性阶段； D^e 为弹性本构矩阵，模量采用弹性模量 E ； D^p 为塑性本构矩阵，模量采用硬化模量 E_p 。

9.8 (热)弹性/弹塑性力学控制方程

至此，我们可以对开展（热）弹性/弹塑性力学计算所需的控制方程进行归纳总结：

| | | | |
|----------|----------|---|---------|
| 弹性力学控制方程 | 应力平衡微分方程 | $\begin{bmatrix} \frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + f_x \\ \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_y}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + f_y \\ \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_z}{\partial z} + f_z \end{bmatrix} = 0$ | [9.8.1] |
| | 几何方程 | $\begin{bmatrix} \varepsilon_x & \gamma_{xy} & \gamma_{xz} \\ \bullet & \varepsilon_y & \gamma_{yz} \\ \bullet & \bullet & \varepsilon_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}\right) \\ \bullet & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z}\right) \\ \bullet & \bullet & \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix}$ | [9.8.2] |
| | 弹性本构方程 | $\sigma = D^e \varepsilon$ | [9.8.3] |

| | | | |
|------------|----------|--|----------|
| 热弹性力学控制方程 | 应力平衡微分方程 | $\begin{bmatrix} \frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + f_x \\ \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_y}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + f_y \\ \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_z}{\partial z} + f_z \end{bmatrix} = 0$ | [9.8.4] |
| | 几何方程 | $\begin{bmatrix} \varepsilon_x & \gamma_{xy} & \gamma_{xz} \\ \bullet & \varepsilon_y & \gamma_{yz} \\ \bullet & \bullet & \varepsilon_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\ \bullet & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \\ \bullet & \bullet & \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix}$ | [9.8.5] |
| | 弹性本构方程 | $\sigma = D^e (\varepsilon - \varepsilon_T)$ | [9.8.6] |
| 弹塑性力学控制方程 | 应力平衡微分方程 | $\begin{bmatrix} \frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + f_x \\ \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_y}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + f_y \\ \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_z}{\partial z} + f_z \end{bmatrix} = 0$ | [9.8.7] |
| | 几何方程 | $\begin{bmatrix} \varepsilon_x & \gamma_{xy} & \gamma_{xz} \\ \bullet & \varepsilon_y & \gamma_{yz} \\ \bullet & \bullet & \varepsilon_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\ \bullet & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \\ \bullet & \bullet & \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix}$ | [9.8.8] |
| | 弹性本构方程 | $d\sigma = D^{ep} d\varepsilon$ | [9.8.9] |
| 热弹塑性力学控制方程 | 应力平衡微分方程 | $\begin{bmatrix} \frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + f_x \\ \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_y}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + f_y \\ \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_z}{\partial z} + f_z \end{bmatrix} = 0$ | [9.8.10] |

| | | | |
|--|--------|---|----------|
| | 几何方程 | $\begin{bmatrix} \varepsilon_x & \gamma_{xy} & \gamma_{xz} \\ \bullet & \varepsilon_y & \gamma_{yz} \\ \bullet & \bullet & \varepsilon_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}\right) \\ \bullet & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z}\right) \\ \bullet & \bullet & \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix}$ | [9.8.11] |
| | 弹性本构方程 | $d\sigma = D^{ep}(d\varepsilon - d\varepsilon_T)$ | [9.8.12] |

需要说明的是，上述四种情形下的控制方程是基于一定的假设与简化：

- 1) 材料的**连续性**假设；
- 2) 材料的均匀性与**各向同性**假设；
- 3) 材料物性参数的**温度依赖**假设；
- 4) 不考虑材料的黏性效应和蠕变效应，不考虑鲍辛格效应，拉伸与压缩的弹性模量和屈服极限相同；
- 5) **准静力平衡**假设；
- 6) **小变形**假设，即变形量远远小于自身的尺寸，事实上，即使处理大变形，我们可以将大变形视为许多小变形的组合，计算过程中重新划分网格即可；
- 7) 采用**双线性等向强化模型**对塑性行为进行简化。

9.9 金属材料的应力数值模拟研究

金属材料的应力数值模拟涉及到三类控制方程，分别为：**平衡微分方程**(力的平衡关系)、**几何方程**(应变与位移的关系)、物理方程即**本构方程**(应力与应变的关系)。依据金属材料所处的状态不同，所采用的本构模型存在差别。

(1) 固态情形

所谓固态情形，指的是金属材料一直处于固相线温度以下，不存在相变。固态情形又可以细分为三种：① 固态小变形，恒温；② 固态小变形，变温；③ 固态大变形。

① 固态小变形，恒温

此情形下，认为金属材料的变形相比于材料尺寸而言可忽略不计，并没有温度载荷的作用。典型的应用场景为常温下的结构力学，主要采用的本构模型为线弹性模型与弹塑性模型。

② 固态小变形，变温

此情形下，认为金属材料的变形相比于材料尺寸而言可忽略不计，但由于存在温度的变化，需要考虑温度载荷的影响。典型的应用场景为凝固完成之后铸件的应力演变，主要采用的本构模型为热弹性模型与热弹塑性模型。

③ 固态大变形

此情形下，认为需要考虑金属材料的变形对计算区域的影响，因此计算过程中往往涉及到网格重划。典型的应用场景为板料成形、锻造等。板料成形计算所采用的本构模型通常为弹塑性模型。锻造计算所用的本构模型通常为刚塑性模型，即忽略弹性变形的影响。当然，上述本构模型中也可加入温度载荷的影响。

(2) 固液共存情形

所谓固液共存情形，指的是金属材料部分区域处于固液相线温度之间，甚至是液相线温度之上。典型的应用场景为凝固过程中的铸件应力演变。此情形下会出现液态、准固态(固液两相共存区)、固态三相共存的情况，所涉及的应力应变本构关系非常复杂，目前尚未有任何数学模型能很好地表达金属材料在此情形下的力学行为。目前，不少学者对固液两相区流变学模型的构建和应用做了相关研究，主要是在本构模型中加入黏弹性和黏塑性的特征。

参考资料：

- [1] 吴树森. 材料成形原理(第3版). p.276-p.305.
- [2] 吴树森. 材料成形原理(第3版). p.325.
- [3] 陈涛. 基于有限元法的铸造热应力数值模拟及其智能化技术的研究[D]. 华中科技大学. p.61-p62.
- [4] 陈涛. 基于有限元法的铸造热应力数值模拟及其智能化技术的研究[D]. 华中科技大学. p.60-p65.
- [5] 图片来源于“黄亮. 材料成形理论基础”以及“陈涛. 基于有限元法的铸造热应力数值模拟及其智能化技术的研究”。

十、有限单元法

有限元法首先需要建立参考单元和参考节点,图 10.1 展示的是典型的等腰直角四面体参考单元以及 10 节点参考节点。参考单元的形状确定(边 01、边 02、边 03 均为单位长度,边 01、边 02、边 03 方向均为主轴方向),参考节点的坐标确定^[1](图 10.2)。

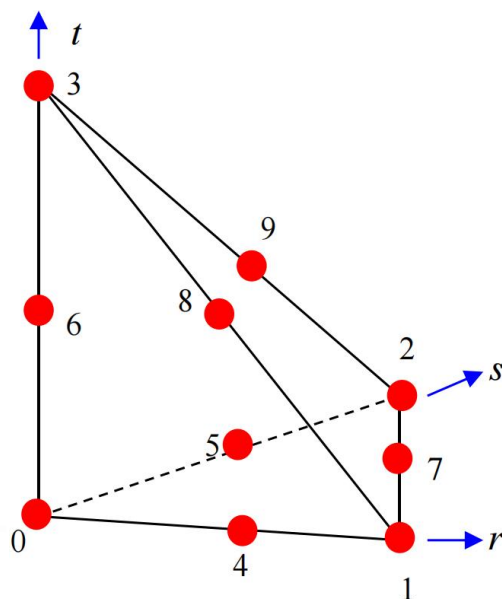


图 10.1 参考单元与参考节点

```
xtreal simplex32_ref[10][3] =  
{  
    { 0.0, 0.0, 0.0 },  
    { 1.0, 0.0, 0.0 },  
    { 0.0, 1.0, 0.0 },  
    { 0.0, 0.0, 1.0 },  
    { 0.5, 0.0, 0.0 },  
    { 0.0, 0.5, 0.0 },  
    { 0.0, 0.0, 0.5 },  
    { 0.5, 0.5, 0.0 },  
    { 0.0, 0.5, 0.5 },  
    { 0.5, 0.0, 0.5 },  
};
```

图 10.2 10 个参考节点在参考单元内的坐标

接着引入**插值函数**，即针对不同参考节点规定对应的多项式，插值函数的特点是将对应节点的坐标代入对应的插值函数中得到的值为1，当节点和插值函数不对应时得到的值为0（图 10.3）。插值函数的作用是只要知道参考节点的物理量，参考单元内任意位置上的物理量可以通过各参考节点的物理量值和对应的插值函数获得，从而实现在微小单元用插值多项式近似代替解。使用**二次插值函数**的原因是，应力应变计算时往往需要插值函数做一次偏导，二次插值函数可以保证单元内应力应变变化的连续性。

$$N_i(\bar{r}_j) = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad [10.1]$$

$$u(\bar{r}) = \sum_{i=0}^9 N_i(\bar{r}) \cdot u_i \quad [10.2]$$

```
xtreal simplex32_interpolation[10][10] =
{
// 1, r, s, t, r2, rs, rt, s2, st, t2
{ 1, -3, -3, -3, 2, 4, 4, 2, 4, 2 }, // { 0.0, 0.0, 0.0 },
{ 0, -1, 0, 0, 2, 0, 0, 0, 0, 0 }, // { 1.0, 0.0, 0.0 },
{ 0, 0, -1, 0, 0, 0, 0, 2, 0, 0 }, // { 0.0, 1.0, 0.0 },
{ 0, 0, 0, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 2 }, // { 0.0, 0.0, 1.0 },
{ 0, 4, 0, 0, -4, -4, -4, 0, 0, 0 }, // { 0.5, 0.0, 0.0 },
{ 0, 0, 4, 0, 0, -4, 0, -4, -4, 0 }, // { 0.0, 0.5, 0.0 },
{ 0, 0, 0, 4, 0, 0, -4, 0, -4, -4 }, // { 0.0, 0.0, 0.5 },
{ 0, 0, 0, 0, 0, 4, 0, 0, 0, 0 }, // { 0.5, 0.5, 0.0 },
{ 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 4, 0 }, // { 0.0, 0.5, 0.5 },
{ 0, 0, 0, 0, 0, 0, 4, 0, 0, 0 }, // { 0.5, 0.0, 0.5 },
};
```

这里 $N_0 = 1 - 3r - 3s - 3t + 2r^2 + 4rs + 4rt + 2s^2 + 4st + 2t^2$

图 10.3 各参考节点对应的插值函数

当我们将参考单元的物理量进行**体积分**时，我们可以利用**高斯积分**方法将体积分转换为高斯积分点物理量的求和，即将**体积分运算转换为求和运算**：

$$\int_{\Omega^e} f(\bar{r}) d\Omega = \sum_i a_i f(\bar{g}_i) \quad [10.3]$$

式中， a_i 为**高斯积分系数**， \bar{g}_i 为**高斯积分点**。

对于四面体参考单元而言，二次高斯积分系数和二次高斯积分点如图 10.4~图 10.6 所示。

```
xtreal simplex32_integral_coeff[4] =
{
    1./24., 1./24., 1./24., 1./24.
};
```

图 10.4 二次高斯积分系数（体积分）

```
#define a (5-sqrt_5)*0.05
#define b (5+3*sqrt_5)*0.05
xtreal simplex32_integral_points[4][3] =
{
    { a, a, a },
    { a, b, a },
    { a, a, b },
    { b, a, a },
};
```

图 10.5 二次高斯积分点（体积分）

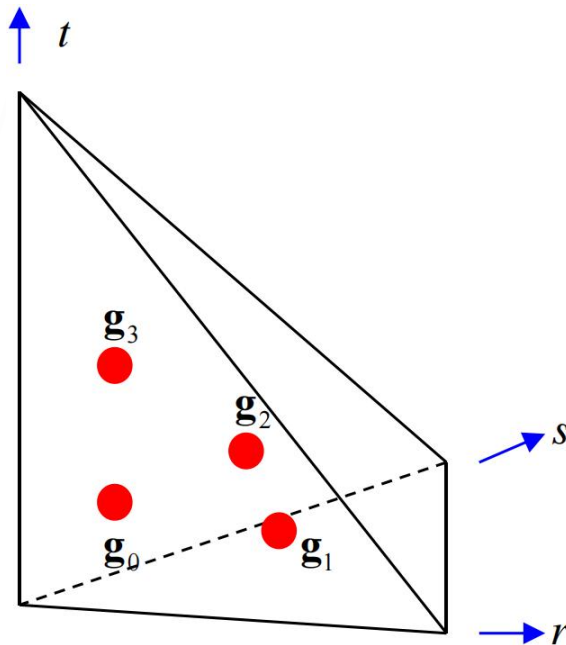


图 10.6 二次高斯积分点位置（体积分）

当我们对表面进行积分时，我们同样可以利用高斯积分方法将面积分转换为高斯积分点物理量的求和，即将面积分运算转换为求和运算。此时的高斯积分点位置是以局部坐标系来确定的（图 10.7~图 10.9）。

$$\int_{\Gamma^e} f(\vec{r}) d\Gamma = \sum_i a_i f(\vec{g}_i) \quad [10.4]$$

```
xtreal simplex22_integral_coeff[3] =
{
    1./6., 1./6., 1./6.
};
```

图 10.7 二次高斯积分系数（面积分）

```
xtreal simplex22_integral_points[3][2] =
{
    { 1./6., 1./6. },
    { 2./3., 1./6. },
    { 1./6., 2./3. },
};
```

图 10.8 二次高斯积分点（面积分）

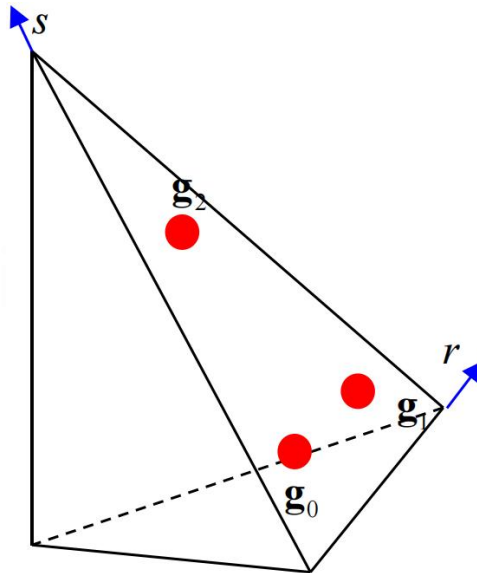


图 10.9 二次高斯积分点位置（面积分）

至此，我们已知参考单元的形状以及参考节点的坐标，如果我们知道参考节点的物理量，那么针对参考单元的体积分和面积分我们都可以得到了。但是实际计算过程中，划分的四面体网格的形状千差万别，而我们需要针对实际的四面体进行体积分和面积分，于是我们需要在整体坐标系下进行数值积分。

当我们针对**整体坐标系** $\Omega(\bar{x})$ 进行体积分时，我们可以利用 **Jacobian 矩阵**（雅克比矩阵）为整体坐标系 $\Omega(\bar{x})$ 下的体积分与**参考单元坐标系** $\Omega^e(\bar{r})$ 下的体积分建立联系。下式给出了如何利用 Jacobian 矩阵为插值函数及其偏导建立转换关系：

$$\int_{\Omega} N_i(\bar{x}) d\Omega = |J_{x-r}| \cdot \int_{\Omega^e} N_i(\bar{r}) d\Omega \quad [10.5]$$

$$\int_{\Omega} \frac{\partial N_i(\bar{x})}{\partial x} d\Omega = |J_{x-r}| \cdot \sum_p \left(\frac{\partial r_p}{\partial x} \cdot \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_i(\bar{r})}{\partial r_p} d\Omega \right) \quad [10.6]$$

$$\int_{\Omega} \frac{\partial N_i(\bar{x})}{\partial x} \frac{\partial N_j(\bar{x})}{\partial y} d\Omega = |J_{x-r}| \cdot \sum_p \sum_q \left(\frac{\partial r_p}{\partial x} \frac{\partial r_q}{\partial y} \cdot \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_i(\bar{r})}{\partial r_p} \frac{\partial N_j(\bar{r})}{\partial r_q} d\Omega \right) \quad [10.7]$$

$$J_{x-r} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial s} & \frac{\partial x}{\partial t} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial s} & \frac{\partial y}{\partial t} \\ \frac{\partial z}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial s} & \frac{\partial z}{\partial t} \end{bmatrix} \quad [10.8]$$

式中， J_{x-r} 为 Jacobian 矩阵， $|J_{x-r}|$ 为 Jacobian 矩阵的行列式。可以认为 Jacobian 矩阵中的各元素值是由整体坐标系下四面体的顶点坐标以及插值函数对 $r_p(r, s, t)$ 的偏导（该偏导就是求多项式的导数）决定，可见针对整体坐标系下不同的四面体单元，其 Jacobian 矩阵的行列式都是不一样的。式[10.5]中的 $\int_{\Omega^e} N_i(\bar{r}) d\Omega$ 、式[10.6]中的 $\int_{\Omega^e} \frac{\partial N_i(\bar{r})}{\partial r_p} d\Omega$ 、式[10.7]中的 $\int_{\Omega^e} \frac{\partial N_i(\bar{r})}{\partial r_p} \frac{\partial N_j(\bar{r})}{\partial r_q} d\Omega$ 就是求参考单元的体积分，即我们可以利用式[10.3]将其转换为求和运算。式[10.6]中的 $\frac{\partial r_p}{\partial x}$ 、式[10.7]中的 $\frac{\partial r_p}{\partial x} \frac{\partial r_q}{\partial y}$ 就是 **Jacobian 逆矩阵** 中的元素。

如何理解 Jacobian 矩阵？可以将 Jacobian 矩阵视为一类数学思想，即当我们描述同类事物时，我们需要建立同类事物之间的联系，这种联系往往需要使用到 **Jacobian 矩阵**。举个例子，我们建立了两个不同的坐标系 A 和 B，某个时刻下点 P 在坐标系 A 下的速度为 \bar{U}_A ，此时点 P 在坐标系下的速度为 \bar{U}_B 。由于 \bar{U}_A 和 \bar{U}_B 描述的都是当前时刻下点 P 的速度，很显然， \bar{U}_A 和 \bar{U}_B 应当具有某种转换关系，这种转换关系就是 Jacobian 矩阵（此时的 Jacobian 矩阵与坐标系 A、B 之间的相对位姿相关，此操作在机器人控制领域被广泛使用）。在本文中，Jacobian 矩阵建立的是参考单元与整体坐标系下四面体单元之间的联系，可见，在处理不同问题时 Jacobian 矩阵的形式是不一样的。

当我们针对整体坐标系 $\Omega(\bar{x})$ 下单元的某个三角面进行面积分，我们可以利用 Jacobian 矩阵为整体坐标系 $\Omega(\bar{x})$ 下的面积分与参考单元坐标系 $\Omega^e(\bar{r})$ 下的面积分建立联系：

$$\int_{\Gamma} q(\bar{x})d\Gamma = |J_{x-r}| \cdot \int_{\Gamma^e} q(\bar{r})d\Gamma \quad [10.9]$$

$$J_{x-r} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial s} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial s} \end{bmatrix} \quad [10.10]$$

进一步，我们可以利用式[10.4]和式[10.2]将式[10.9]中的面积分 $\int_{\Gamma^e} q(\bar{r})d\Gamma$ 表示为插值函数与其对应参考节点物理量乘积的组合。当我们选定整体坐标系下某个四面体的某个三角面 Γ 之后，在参考单元坐标系下就会有对应的三角面 Γ^e ，进而将面积分 $\int_{\Gamma^e} q(\bar{r})d\Gamma$ 表示为：

$$\int_{\Gamma^e} q(\bar{r})d\Gamma = \frac{1}{6}q(\bar{r}_a) + \frac{1}{6}q(\bar{r}_b) + \frac{1}{6}q(\bar{r}_c) \quad [10.11]$$

式中， $\bar{r}_a, \bar{r}_b, \bar{r}_c$ 就是图 10.8 中的二次高斯积分点（面积分）。

接着我们可以将 $q(\bar{r}_a), q(\bar{r}_b), q(\bar{r}_c)$ 写成插值函数的组合：

$$q(\bar{r}_a) = \sum_{i=0}^9 N_i(\bar{r}_a)q(\bar{r}_i) \quad [10.12]$$

$$q(\bar{r}_b) = \sum_{i=0}^9 N_i(\bar{r}_b)q(\bar{r}_i) \quad [10.13]$$

$$q(\bar{r}_c) = \sum_{i=0}^9 N_i(\bar{r}_c)q(\bar{r}_i) \quad [10.14]$$

式中， $q(\bar{r}_i)$ 是各个参考节点处的物理量。

分析式[10.11]~式[10.14]可知，面积分 $\int_{\Gamma^e} q(\bar{r})d\Gamma$ 应该可以直接表示为参考节点物理量的组合，图 10.10 给出了针对参考单元的四个三角面进行面积分时，各参考节点物理量的组合系数。图中的每一列就代表对某个三角面进行面积分时各参考节点的系数，比如三角面为参考单元的第二个面，那么就有：

$$\int_{\Gamma^e} q(\bar{r})d\Gamma = \frac{1}{6}q(\bar{r}_5) + \frac{1}{6}q(\bar{r}_6) + \frac{1}{6}q(\bar{r}_8) \quad [10.15]$$

进一步：

$$\int_{\Gamma} q(\bar{x})d\Gamma = |J_{x-r}| \cdot \int_{\Gamma^e} q(\bar{r})d\Gamma = |J_{x-r}| \cdot \left[\frac{1}{6}q(\bar{r}_5) + \frac{1}{6}q(\bar{r}_6) + \frac{1}{6}q(\bar{r}_8) \right] \quad [10.16]$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/6 & 1/6 \\ 0 & 1/6 & 0 & 1/6 \\ 0 & 1/6 & 1/6 & 0 \\ 1/6 & 0 & 0 & 1/6 \\ 1/6 & 1/6 & 0 & 0 \\ 1/6 & 0 & 1/6 & 0 \end{bmatrix}$$

图 10.10 针对参考单元的四个三角面进行面积分时组合系数

需要说明的是，面积分使用的雅可比矩阵与体积分使用的雅可比矩阵是不一样的。面积分使用的雅可比矩阵的行列式的物理含义是整体坐标系下三角面面积的二倍，而体积分使用的雅可比矩阵的行列式的物理含义是整体坐标系下四面体体积的六倍。以上操作教会我们当面对整体坐标系下的单元体积分和三角面面积分时，我们可以利用雅可比矩阵、插值函数以及参考单元的物理量进行组合。

以采用有限元法求解 Laplace 方程为例（可视为稳态热传导方程），假设边界 Γ 可分为 Γ_c 和 Γ_q 两部分（ Γ_c 为第一类边界条件， Γ_q 为第二类边界条件，图 10.11）。

$$\nabla^2 T + Q = 0 \quad [10.17]$$

$$T = T_0 \quad (\text{第一类边界条件}) \quad [10.18]$$

$$\vec{n} \cdot \nabla T = q \quad (\text{第二类边界条件}) \quad [10.19]$$

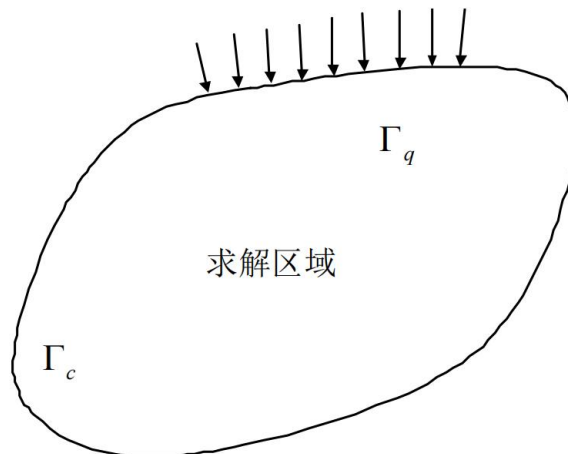


图 10.11 边界条件示意图

对式[10.17]进行体积分，对式[10.19]进行面积分，并对两者进行组合：

$$\int_{\Omega} v(\nabla^2 T + Q)d\Omega + \int_{\Gamma_q} w(\bar{n} \cdot \nabla T - q)d\Gamma = 0 \quad [10.20]$$

式[10.20]中的 v 和 w 为任意函数，进一步假设 $w = -v$ ，经过数学处理可得：

$$\int_{\Omega} (\nabla v \cdot \nabla T)d\Omega = \int_{\Omega} vQd\Omega + \int_{\Gamma_q} vqd\Gamma \quad [10.21]$$

对于整体坐标系下的某个单元而言，采用插值函数来代替未知量

$$T = \sum_{i=0}^9 N_i(\bar{x})T_i, \text{ 即可得:}$$

$$\begin{aligned} & \sum_{i=0}^9 \sum_{j=0}^9 \left[v_i \cdot \int_{\Omega} \left(\frac{\partial N_i(\bar{x})}{\partial x} \frac{\partial N_j(\bar{x})}{\partial x} + \frac{\partial N_i(\bar{x})}{\partial y} \frac{\partial N_j(\bar{x})}{\partial y} + \frac{\partial N_i(\bar{x})}{\partial z} \frac{\partial N_j(\bar{x})}{\partial z} \right) d\Omega \cdot T_j \right] \\ & = \sum_{i=0}^9 \left(v_i \cdot \int_{\Omega} N_i(\bar{x})Qd\Omega + v_i \cdot \int_{\Gamma_q} N_i(\bar{x})qd\Gamma \right) \end{aligned} \quad [10.22]$$

理解式[10.22]的方法是：认为矩阵 $V_{10 \times 1}$ 代表该单元 10 个节点的 v_i 值，矩阵

$T_{10 \times 1}$ 代表该单元 10 个节点的 T_i 值，那么式 [10.22] 其实等同于

$$(V_{10 \times 1})^T K_{10 \times 10} T_{10 \times 1} = (V_{10 \times 1})^T P_{10 \times 1}, \text{ 式[10.22]中的 } \sum_{i=0}^9 \sum_{j=0}^9 (\dots) \text{ 操作对应与矩阵 } K_{10 \times 10} \text{ 的}$$

各个元素，式[10.22]中的 $\sum_{i=0}^9 (\dots)$ 操作对应与矩阵 $P_{10 \times 1}$ 的各个元素。由于 v 是任意

函数，于是可得：

$$K_{10 \times 10} T_{10 \times 1} = P_{10 \times 1} \quad [10.23]$$

$$K_{ij} = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial N_i(\bar{x})}{\partial x} \frac{\partial N_j(\bar{x})}{\partial x} + \frac{\partial N_i(\bar{x})}{\partial y} \frac{\partial N_j(\bar{x})}{\partial y} + \frac{\partial N_i(\bar{x})}{\partial z} \frac{\partial N_j(\bar{x})}{\partial z} \right) d\Omega \quad [10.24]$$

$$P_i = \int_{\Omega} N_i(\bar{x})Qd\Omega + \int_{\Gamma_q} N_i(\bar{x})qd\Gamma \quad [10.25]$$

式[10.24]和式[10.25]需要在整体坐标系下进行体积分和面积分，于是可以使用式[10.5]、式[10.6]、式[10.7]、式[10.9]所示的方法将其转换为雅克比矩阵行列式与参考单元坐标系下的体积分和面积分，进而转换为雅克比矩阵行列式与参考节点物理量的组合。

事实上，我们有很多个四面体，每针对一个四面体都需要进行式[10.23]所示的矩阵组装。如果整个计算网格一共有 n 个计算节点（二次单元），那我们应该对如下矩阵进行组装：

$$\mathbf{K}_{n \times n} \mathbf{T}_{n \times 1} = \mathbf{P}_{n \times 1} \quad [10.26]$$

$$\mathbf{K}_{ij} = \sum_{sum} \int_{\Omega} \left(\frac{\partial N_i(\bar{x})}{\partial x} \frac{\partial N_j(\bar{x})}{\partial x} + \frac{\partial N_i(\bar{x})}{\partial y} \frac{\partial N_j(\bar{x})}{\partial y} + \frac{\partial N_i(\bar{x})}{\partial z} \frac{\partial N_j(\bar{x})}{\partial z} \right) d\Omega \quad [10.27]$$

$$\mathbf{P}_i = \sum_{sum} \int_{\Omega} N_i(\bar{x}) Q d\Omega + \sum_{sum} \int_{\Gamma^q} N_i(\bar{x}) q d\Gamma \quad [10.28]$$

式中， $\mathbf{K}_{n \times n}$ 为刚度矩阵， $\mathbf{P}_{n \times 1}$ 为载荷向量。 \mathbf{K}_{ij} 的物理含义是节点 i 与节点 j 之间的关联。很明显，当某个节点（如编号为 100 的节点）只属于一个单元时，刚度矩阵的第 100 行或第 100 列最多只有 10 个不为零的元素，如果该节点同时属于三个单元，刚度矩阵的第 100 行或第 100 列不为零的元素个数最多为 28。需要说明的是，上面没有对第一类边界条件进行组装，一般对于第一类边界条件的处理是在上面组装结束之后，采用**赋 0 赋 1 法**进行处理。

如采用有限单元法求解**热弹性方程**（这里不做具体推导），基于弹性力学控制方程，利用最小势能原理、泛函、变分等处理，可以得到如下矩阵等式^[2]：

$$\mathbf{K}_{3n \times 3n} \mathbf{U}_{3n \times 1} = \mathbf{P}_{3n \times 1} \quad [10.29]$$

$$\mathbf{K}_{3n \times 3n} = \sum_{sum} \mathbf{K}_{30 \times 30} = \sum_{sum} \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \mathbf{L}^T \mathbf{D} \mathbf{L} \mathbf{N} d\Omega \quad [10.30]$$

$$\mathbf{D}_{6 \times 6} = \begin{bmatrix} 2G + \lambda & \lambda & \lambda & & & \\ \lambda & 2G + \lambda & \lambda & & & \\ \lambda & \lambda & 2G + \lambda & & & \\ & & & 2G & & \\ & & & & 2G & \\ & & & & & 2G \end{bmatrix} \quad [10.31]$$

$$\mathbf{L}_{6 \times 3} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & & \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial y} & \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} & & \\ & \frac{\partial}{\partial y} & & \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} & \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial y} & \\ & & \frac{\partial}{\partial z} & \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} & \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} & \end{bmatrix}^T \quad [10.32]$$

$$\mathbf{N}_{3 \times 30} = \begin{bmatrix} N_0 & & & & N_9 & & & \\ & N_0 & & \dots & & & N_9 & \\ & & N_0 & & & & & N_9 \end{bmatrix} \quad [10.33]$$

$$\mathbf{P}_{3n \times 1} = \sum_{sum} \mathbf{P}_{30 \times 1} = \sum_{sum} \left(\int_{\Omega} \mathbf{N}^T \mathbf{L}^T \mathbf{D} \boldsymbol{\varepsilon}_0 d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \mathbf{F} d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{N}^T \mathbf{T} d\Gamma \right) \quad [10.34]$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_0 = [1 \quad 1 \quad 1 \quad 0 \quad 0 \quad 0]^T \alpha \Delta T \quad [10.35]$$

式中， $U_{3 \times 1}$ 为位移向量（包含 3 个方向的位移）， ε_0 为热应变向量。式[10.34]中右端第一项代表**热载荷**，第二项代表**体积力**，第三项代表**面力**。由式[10.29]得到位移之后，再通过几何方程得到应变分布，接着通过本构方程得到应力分布。

如采用有限单元法求解**热弹塑性方程**（这里不做具体推导），需要将整个成形过程分为多个增量步，参考热弹性方程的有限元求解，求解第*i*个增量步的位移向量增量的矩阵等式为^[2]：

$$\{K\}_i \{\Delta U\}_i = \{P\}_i \quad [10.36]$$

$$\{K\}_i = \sum_{\text{sum}} \int_{\Omega} N^T L^T \{D\}_i L N d\Omega \quad [10.37]$$

$$\{P\}_i = \sum_{\text{sum}} \left(\int_{\Omega} N^T L^T \{D\}_i \{\Delta \varepsilon_0\}_i d\Omega + \int_{\Omega} N^T \{F\}_i d\Omega + \int_{\Gamma} N^T \{T\}_i d\Gamma \right) \quad [10.38]$$

$$\{\Delta \varepsilon_0\}_i = [1 \ 1 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0]^T \alpha \{\Delta T\}_i \quad [10.39]$$

式中， $\{K\}_i$ 、 $\{\Delta U\}_i$ 和 $\{P\}_i$ 分别为第*i*个增量步的刚度矩阵、位移向量增量和载荷向量； $\{D\}_i$ 为第*i*个增量步的弹塑性本构矩阵； $\{\Delta \varepsilon_0\}_i$ 为第*i*个增量步的热应变向量。

需要说明的是，这里只是对有限单元法的基本思想和简要的矩阵组装过程进行了说明，深入的理论推导与计算请查阅相关书籍和论文^[3,4]。

参考资料：

- [1] 陈涛. 有限元笔记.
- [2] 陈涛. 基于有限元法的铸造热应力数值模拟及其智能化技术的研究[D]. 华中科技大学. p.72-p78.
- [3] 王勖成. 有限单元法.
- [4] 曹流. 基于有限元法的定向凝固过程温度场数值模拟的研究[D]. 华中科技大学, 2015.
- [5] 图片来源于“陈涛. 有限元笔记”.