1 Уравнение Переноса

Уравнение переноса в общем случае имеет следующий вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (f\overrightarrow{u}) = 0 \tag{1}$$

Где u – векторное поле скоростей, f - переносимая скалярная величина, ∇ – оператор дивергенции. Определим f как функцию Хевисайда, принимающую значения 0 и 1:

$$f(x,t) = \begin{cases} 1 & \mathbf{x} \in liquid \\ 0 & \mathbf{x} \notin liquid \end{cases} \tag{2}$$

В одномерном случае уравнение сводится к виду:

$$\frac{\mathrm{d}f_x}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}(f_x u_x)}{\mathrm{d}x} = 0 \tag{3}$$

В дальнейшем будем обозначать f_x u_x просто как f и u, подразумевая значения, взятые вдоль направлений соответствующих осей.

2 Численное решение

2.1 Численное решение в общем случае

Для численного решения проводится дискретизация:

Отрезок $[0; X]$, на котором рассматривается данное уравнение, разбивается на *cellCount* последовательных подотрезков, длиной Δx_i каждый – ячейки сетки. i=1..cellCount. Положения $x_{i-\frac{1}{2}}$, $x_{i+\frac{1}{2}}$ являются узлами данной сетки (ребрами ячеек). $\Delta x_i = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}$. Для реализации программы была выбрана равномерная сетка с ячейками равной длины Δx. Зададим длину временного шага Δt и построим схему для вычисления средних значений функции $f(x,t)$ в каждой ячейке.

$$\overline{f}_i^n = \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} f(x, t_n) dx \tag{4}$$

- среднее по ячейке значение функции $f(x,t)$ на i-ом отрезке Δx_i на n-ом временном шаге. В дальнейшем будем обозначать его как просто f_i^n.

Проинтегрируем уравнение переноса в одномерном случае (3) по времени на шаге $[t_n; t_{n+1}]$:

$$(f^{n+1} - f^n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{\mathrm{d}(fu)}{\mathrm{d}x} d\tau = 0$$

Для численного дифференцирования используем явную разностную схему 2 порядка:

$$\frac{\mathrm{d}(fu)}{\mathrm{d}x} = \frac{f_{i+\frac{1}{2}} u_{i+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2}} u_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x_i}$$

В результате уравнение переноса преобразуется к виду:

$$(f_i^{n+1} - f_i^n) + \frac{1}{\Delta x_i} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f_{i+\frac{1}{2}} u_{i+\frac{1}{2}} d\tau - \frac{1}{\Delta x_i} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f_{i-\frac{1}{2}} u_{i-\frac{1}{2}} d\tau = 0 \tag{5}$$

2.2 Поле скоростей твердого тела

Поле скоростей твердого тела связано по формуле Эйлера:

$$\overrightarrow{u}(\overrightarrow{r}, t) = \overrightarrow{v_c}(t) + [\overrightarrow{\omega}(t) \times \overrightarrow{r}(t)]$$

Рассмотрим составляющие поля скоростей вдоль направлений X,Y,Z:

$$\overrightarrow{u}(\overrightarrow{r}, t) = (u_x, u_y, u_z)(\overrightarrow{r}, t)$$

$$\overrightarrow{r}(t) = (x - x_c(t), y - y_c(t), z - z_c(t))$$

Векторы $\overrightarrow{v_c}(t)$ и $\overrightarrow{\omega}(t)$ считаются заданными.

$$\overrightarrow{v_c}(t) = (v_{cx}(t), v_{cy}(t), v_{cz}(t))$$

$$\overrightarrow{\omega}(t) = (\omega_x(t), \omega_y(t), \omega_z(t))$$

$$\begin{aligned}
u_x(t) &= v_{cx}(t) + \omega_y(t)z - \omega_y(t)z_c(t) - \omega_z(t)y + \omega_z(t)y_c(t)\\
u_y(t) &= v_{cy}(t) - \omega_x(t)z + \omega_x(t)z_c(t) + \omega_z(t)x - \omega_z(t)x_c(t)\\
u_z(t) &= v_{cz}(t) + \omega_x(t)y - \omega_x(t)y_c(t) - \omega_y(t)x + \omega_y(t)x_c(t)
\end{aligned}$$

Таким образом, можно видеть, что скорости твердого тела вдоль каждого из направлений не зависят от координаты рассматриваемой точки на этом направлении. То есть, например, скорости u_x твердого тела вдоль направления OX не зависят от координаты x, а лишь от положения y и z и от времени t.

В таком случае, при решении уравнения переноса мы можем рассматривать скорость постоянной вдоль каждого из направлений, но зависящей от времени. Поэтому вместо $u_{i-\frac{1}{2}}$, $u_{i+\frac{1}{2}}$ будем рассматривать u, зависящую от времени.

2.3 Численное решение для нестационарного поля скоростей твердого тела

Перепишем уравнение (5), полученное для произвольного поля скоростей, для поля скоростей твердого тела:

$$(f_i^{n+1} - f_i^n) + \frac{1}{\Delta x_i}\int_{t_n}^{t_{n+1}} u f_{i+\frac{1}{2}} d\tau - \frac{1}{\Delta x_i}\int_{t_n}^{t_{n+1}} u f_{i-\frac{1}{2}} d\tau = 0$$

Для вычисления интегралов используем квадратурную формулу трапеции:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} u f_{i+\frac{1}{2}} d\tau = \Delta t \frac{u^{t_{n+1}} f_{i+\frac{1}{2}}^{t_{n+1}} + u^{t_n} f_{i+\frac{1}{2}}^{t_n}}{2}$$

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} u f_{i-\frac{1}{2}} d\tau = \Delta t \frac{u^{t_{n+1}} f_{i-\frac{1}{2}}^{t_{n+1}} + u^{t_n} f_{i-\frac{1}{2}}^{t_n}}{2}$$

Используем данные квадратурные формулы для приближенного вычисления интегралов, подставим их в уравнение:

$$(f_i^{n+1} - f_i^n) + \frac{\Delta t}{2\Delta x_i}(u^{t_{n+1}} f_{i+\frac{1}{2}}^{t_{n+1}} + u^{t_n} f_{i+\frac{1}{2}}^{t_n} - u^{t_{n+1}} f_{i-\frac{1}{2}}^{t_{n+1}} - u^{t_n} f_{i-\frac{1}{2}}^{t_n}) = 0 \quad (6)$$

Значения $u^{t^*} f_{x^*}^{t^*} = \Phi_{x^*}^{t^*}$ представляют собой потоки через грани ячеек. Значения $f_{x^*}^{t^*}$ могут быть вычислены с использованием интерполяционной функции соответствующей методу решения. То есть будут вычислены, как

$$f_{x^*}^{t^*} = \begin{cases} \Psi_L(x(x^*, \tau^*)) & \int_{t_n}^{t_{n+1}} u^\tau d\tau \geq 0 \\ \Psi_R(x(x^*, \tau^*)) & \int_{t_n}^{t_{n+1}} u^\tau d\tau < 0 \end{cases} \tag{7}$$

Таким образом, реализуется метод *upwind*: расчета потоков через грани по направлению переноса. То есть, при вычислении потока $\Phi_{x^*}^{t^*}$ для положительной скорости u переноса на грани ячейки x^* в течение шага $[t_n; t_{n+1}]$, будет использована интерполяционная функция $\Psi_j^{t^*}(x(x^*, t^*))$, построенная на ячейке j слева от данной грани x^*, а при вычислении потока для отрицательной скорости u будет использована интерполяционная функция $\Psi_j^{t^*}(x(x^*, t^*))$, построенная на ячейке j справа от данной грани x^*.
В соответствии с использованными разностными схемами и квадратурными формулами выбранного метода решения необходимо рассчитать следующие потоки:

$$\Phi_{i-\frac{1}{2}}^n = \begin{cases} u^{t_n} \Psi_{i-1}(x(x_{i-\frac{1}{2}}, 0)) & u^{t_n} + u^{t_{n+1}} \geq 0 \\ u^{t_n} \Psi_i(x(x_{i-\frac{1}{2}}, 0)) & u^{t_n} + u^{t_{n+1}} < 0 \end{cases} \tag{8}$$

$$\Phi_{i+\frac{1}{2}}^n = \begin{cases} u^{t_n} \Psi_i(x(x_{i+\frac{1}{2}}, 0)) & u^{t_n} + u^{t_{n+1}} \geq 0 \\ u^{t_n} \Psi_{i+1}(x(x_{i+\frac{1}{2}}, 0)) & u^{t_n} + u^{t_{n+1}} < 0 \end{cases} \tag{9}$$

$$\Phi_{i-\frac{1}{2}}^{n+1} = \begin{cases} u^{t_{n+1}} \Psi_{i-1}(x(x_{i-\frac{1}{2}}, \Delta t)) & u^{t_n} + u^{t_{n+1}} \geq 0 \\ u^{t_{n+1}} \Psi_i(x(x_{i-\frac{1}{2}}, \Delta t)) & u^{t_n} + u^{t_{n+1}} < 0 \end{cases} \tag{10}$$

$$\Phi_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} = \begin{cases} u^{t_{n+1}} \Psi_i(x(x_{i+\frac{1}{2}}, \Delta t)) & u^{t_n} + u^{t_{n+1}} \geq 0 \\ u^{t_{n+1}} \Psi_{i+1}(x(x_{i+\frac{1}{2}}, \Delta t)) & u^{t_n} + u^{t_{n+1}} < 0 \end{cases} \tag{11}$$

Подставляя значения потоков (8-11) в уравнение переноса для твердого тела в одномерном случае в виде разностной схемы (6), получим выражение для расчета объемной доли переносимой скалярной величины в ячейке Δx_i на следующем временном шаге t_{n+1}:

$$f_i^{n+1} = f_i^n + \frac{\Delta t}{2\Delta x_i}(\Phi_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} + \Phi_{i+\frac{1}{2}}^n - \Phi_{i-\frac{1}{2}}^{n+1} - \Phi_{i-\frac{1}{2}}^n) = 0 \tag{12}$$

В дальнейшем для выбора интерполяционной функции Ψ_j в исследовании будут рассмотрены такие методы, как метод Годунова (интерполяция константой), метод MUSCL (линейная интерполяция), метод THINC (интерполяция гиперболическим тангенсом) и метод Jump Reconstruction (интерполяция скачком).

3 Метод характеристик

Рассмотрим решение уравнения переноса с помощью метода характеристик.

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}(fu)}{\mathrm{d}x} = 0 \tag{13}$$

Нам бы хотелось свести это дифференциальное уравнение в частных производных первого порядка к обыкновенному дифференциальному уравнению вдоль соответствующей кривой, то есть получить уравнение вида:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} f(x(s), t(s)) = F(f, x(s), t(s))$$

где кривая $(x(s), t(s))$ — характеристика.
Установим, что

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} f(x(s), t(s)) = \frac{\partial f}{\partial x}\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}s} + \frac{\partial f}{\partial t}\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}s} \tag{14}$$

Положим, что

$$\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}s} = 1$$

Следовательно, при $t(0) = 0$, $s = t$. И теперь будем составлять ОДУ, используя метод характеристик в виде:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} f(x(t), t) = F(f, x(t), t)$$

Будем искать решение вдоль характеристик, уравнение которых имеет вид:

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = u(t)$$

В таком случае уравнение (14) можно переписать в виде:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} f(x(t), t) = u(t)\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial t}$$

таким образом, вдоль характеристики $(x(t), t)$ исходное уравнение в частных производных превращается в ОДУ:

$$f'_t = F(f, x(t), t) = 0$$

Данное уравнение говорит о том, что вдоль характеристик решение постоянное. Таким образом, $f(x,t) = f(x_0, 0)$, где точки (x, t) и $(x_0, 0)$ лежат на одной характеристике. Видно, что для нахождения общего решения достаточно найти характеристики уравнения в виде:

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = u(t) \tag{15}$$

Будем искать решение на временном слое t_n.
τ - время на слое $[t_n; t_{n+1}]$. То есть $\tau = 0 \Leftrightarrow t = t_n$, $\tau = \Delta t \Leftrightarrow t = t_{n+1}$.
Проинтегрируем уравнение (15) по t от t_n до $t_n + \tau$:

$$x(t_n + \tau) - x(t_n) = \int_{t_n}^{t_n+\tau} u(t)dt + C \tag{16}$$

Что является общим видом характеристической функции для данного уравнения в частных производных.
Найдем такую характеристику, которая в момент времени τ^* проходила

через точку x^*. Подставим в характеристическую функцию (16) данные начальные условия:

$$x(t_n + \tau^*) - x(t_n) = \int_{t_n}^{t_n+\tau^*} u(t)dt + C^*$$

Тогда

$$C^* = x^* - x(t_n) - \int_{t_n}^{t_n+\tau^*} u(t)dt$$

Подставим C^* обратно в общий вид уравнения характеристической функции (16), чтобы получить характеристику:

$$x(t_n + \tau) - x(t_n) = \int_{t_n}^{t_n+\tau} u(t)dt + x^* - x(t_n) - \int_{t_n}^{t_n+\tau^*} u(t)dt$$

$$x(t_n + \tau) = \int_{t_n}^{t_n+\tau} u(t)dt + x^* - \int_{t_n}^{t_n+\tau^*} u(t)dt \tag{17}$$

Узнаем координату, из которой выходила данная характеристика в момент времени $\tau = 0$:

$$x \mid_{\tau=0} = \int_{t_n}^{t_n} u(t)dt + x^* - \int_{t_n}^{t_n+\tau^*} u(t)dt$$

$$x \mid_{\tau=0} = x^* - \int_{t_n}^{t_n+\tau^*} u(t)dt \tag{18}$$