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:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial (f u_x)}{\partial x} = 0 \tag{3}$$

1.1 Численное решение

Дискретизация. 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.

Численное решение в общем случае. 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:

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

1.2 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.

Численное решение для нестационарного поля скоростей твердого тела. Перепишем уравнение (5), полученное для произвольного поля скоростей, для поля скоростей твердого тела:

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

Интегралы

$$\Phi_{i+\frac{1}{2}} = \int_{t_n}^{t_{n+1}} u f_{i+\frac{1}{2}} d\tau \tag{6}$$

$$\Phi_{i-\frac{1}{2}} \int_{t_n}^{t_{n+1}} u f_{i-\frac{1}{2}} d\tau \tag{7}$$

представляют собой потоки через правую $x_{i+\frac{1}{2}} = x_R$ и левую $x_{i-\frac{1}{2}} = x_L$ грани ячейки $\Delta x_i = \Delta x$ соответственно.

Для вычисления значений $f_{x^*}^{t^*}$ необходимо построить подсеточную реконструкцию решения на соответствующей ячейке. При таком подходе значения $f_{x^*}^{t^*}$ считаются как значения интерполяционной функции, соответствующей методу решения.

$$f_{x^*}^{t^*} = \Psi_0(x^*, t^*)$$

Интерполяционная функция $\Psi_0(x^*, t^*)$:

$$\Psi_0(x^*, t^*) = \begin{cases} \Psi_L(x(x^*, \tau^*)) & \int_{t_n}^{t_{n+1}} u^\tau d\tau \geq 0 \\ \Psi_R(x(x^*, \tau^*)) & \int_{t_n}^{t_{n+1}} u^\tau d\tau < 0 \end{cases} \tag{8}$$

Таким образом, реализуется метод *upwind*: расчета потоков через грани по направлению переноса. То есть, при вычислении потока Φ_{x^*} для положительной скорости u переноса на грани x^* ячейки в течение шага $[t_n; t_{n+1}]$, будет использована интерполяционная функция $\Psi_j(x(x^*, \tau^*))$, построенная на ячейке j слева от данной грани x^*, а при вычислении потока для отрицательной скорости u будет использована интерполяционная функция $\Psi_j(x(x^*, \tau^*))$, построенная на ячейке j справа от данной грани x^*.

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

Выражение для расчета объемной доли переносимой скалярной величины через потоки в ячейке Δx_i на следующем временном шаге t_{n+1} имеет вид:

$$f_i^{n+1} = f_i^n - \frac{1}{\Delta x_i}(\Phi_{i+\frac{1}{2}} - \Phi_{i-\frac{1}{2}}) = 0 \tag{9}$$

1.3 Метод характеристик

Интерполяционные функции $\Psi_i(x)$ - функции координаты. Для интегрирования по времени необходимо представить их как функции времени. Для этого был использован метод характеристик. Данный метод позволяет определить линии в плоскости (x, t), вдоль которых решение постоянно. Это позволяет доставить решение, выходящее из заданного положения $(x(t), t_n)$ в определенную точку $(x^*, t_n + \tau^*)$ в пространстве (x, t). таким образом, появляется возможность вместо координаты x, в качестве аргумента интерполяционной функции $\Psi_i(x)$ использовать функцию времени $x(t)$. Рассмотрим решение уравнения переноса с помощью метода характеристик.

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}(fu)}{\mathrm{d}x} = 0 \tag{10}$$

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

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} f(x(s), t(s)) = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}s} + \frac{\partial f}{\partial t} \frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}s} \tag{11}$$

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 (11) 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:

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = u(t) \tag{12}$$

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 (12) по t от t_n до $t_n + \tau$:

$$x(t_n + \tau) - x(t_n) = \int_{t_n}^{t_n+\tau} u(t)dt + C \tag{13}$$

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 (13) 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 (13), чтобы получить характеристику:

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

$$x(t_n + \tau) = \int_{t_n}^{t_n+\tau} u(t)dt + x^* - \int_{t_n}^{t_n+\tau^*} u(t)dt \tag{14}$$

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

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

$$x \mid_{\tau=0} = x^* - \int_{t_n}^{t_n+\tau^*} u(t)dt \tag{15}$$

Данное значение необходимо использовать как аргумент интерполяционной функции (8).

1.4 Аппроксимация интегралов

В зависимости от выбранного метода подсеточной реконструкции, интегралы в потоках и в характеристике могут быть вычислены приближенно, с использованием квадратурных формул в случае непрерывной интерполяции распределения (этот способ использовался для методов MUSCL и THINC), или точно в случае кусочно-постоянной интерполяции распределения (этот способ использовался для методов MUSCL и THINC).

Непрерывное распределение. Рассмотрим непрерывную реконструкцию распределения. Для вычисления интегралов была использована квадратурная формула трапеции.
Интеграл в характеристике (15) был заменен на квадратурную формулу:

$$x \mid_{\tau=0} = x^* - \int_{t_n}^{t_n+\tau^*} u(t)dt = x^* - \Delta t \frac{u(t_n) + u(t_n + \tau^*)}{2} \tag{16}$$

Для аппроксимации интегралов потоков (6), (7) была использована квадратурная формула трапеции.
Интегралы в потоках были заменены на квадратурные формулы:

$$\Phi_{i+\frac{1}{2}} = \int_{t_n}^{t_{n+1}} u f_{i+\frac{1}{2}} d\tau = \frac{\Delta t}{2}(u^{n+1} f^{n+1}_{i+\frac{1}{2}} + u^n f^n_{i+\frac{1}{2}}) \tag{17}$$

$$\Phi_{i-\frac{1}{2}} = \int_{t_n}^{t_{n+1}} u f_{i-\frac{1}{2}} d\tau = \frac{\Delta t}{2}(u^{n+1} f^{n+1}_{i-\frac{1}{2}} + u^n f^n_{i-\frac{1}{2}}) \tag{18}$$

Таким образом, значения потоков (6), (7) будут иметь вид:

$$\Phi_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\Delta t}{2}(u^n \Psi_0(x(x_{i+\frac{1}{2}}, 0)) + u^{n+1} \Psi_0(x(x_{i+\frac{1}{2}}, \Delta t))) \tag{19}$$

$$\Phi_{i-\frac{1}{2}} = \frac{\Delta t}{2}(u^n \Psi_0(x(x_{i-\frac{1}{2}}, 0)) + u^{n+1}\Psi_0(x(x_{i-\frac{1}{2}}, \Delta t))) \tag{20}$$

Подставляя в них характеристики с координатами соответствующих граней и с нужным шагом по времени, получим окончательный вид уравнений для расчета потоков:

$$\Phi_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\Delta t}{2}(u^n \Psi_0(x_R) + u^{n+1}\Psi_0(x^R - \Delta t\frac{u^n + u^{n+1}}{2}))) \tag{21}$$

$$\Phi_{i-\frac{1}{2}} = \frac{\Delta t}{2}(u^n \Psi_0(x_L) + u^{n+1}\Psi_0(x^L - \Delta t\frac{u^n + u^{n+1}}{2}))) \tag{22}$$