1 Нестационарное уравнение диффузии-конвекции-реакции для трехмерной расчетной области

1.1 Постановка задачи

Уравнение диффузии-конвекции-реакции:

$$c'_t + uc'_x + vc'_y + wc'_z = (\mu c'_x)'_x + (\mu c'_y)'_y + (\nu c'_z)'_z + f, \tag{1}$$

с граничными условиями:

$$c'_n(x, y, z, t) = \alpha_n c + \beta_n, \tag{2}$$

где u, v, w - составляющие вектора скорости, f - функция, описывающая интенсивность и распределение источников, μ - горизонтальная проекция коэффициента диффузионного (турбулентного) обмена, ν - вертикальная проекция коэффициента диффузионного (турбулентного) обмена.

1.2 Построение дискретной модели

Расчетная область вписана в прямоугольный параллелепипед. Для программной реализации математической модели транспорта веществ вводим равномерную расчетную сетку:

$$\begin{aligned} w_h = \{t^n = n\tau, x_i = ih_x, y_j = jh_y, z_k = kh_z, n = \overline{0..N_x}, i = \overline{0..N_x}, \\ j = \overline{0..N_y}, k = \overline{0..N_z}, N_t\tau = l_x, N_y h_y = l_y, N_z h_z = l_z\}, \end{aligned}$$

где τ - шаг по временному направлению, h_x, h_y, h_z - шаги по координатным осям пространства, N_t, N_x, N_y, N_z - границы по времени и пространству.

Аппроксимация уравнения (1) по временной переменной выполняется на основе схем с весами.

$$\frac{\hat{c} - c}{\tau} + u\overline{c}'_x + v\overline{c}'_y + w\overline{c}'_z = (\mu\overline{c}'_x)'_x + (\mu\overline{c}'_y)'_y + (\mu\overline{c}'_z)'_z + f, \tag{3}$$

где

$\bar{c} = \sigma\hat{c} + (1-\sigma), \sigma \in [0,1]$ - вес схемы $(\sigma = 0,5; 0.75; 1)$
$c = c(x,y,z,t); \;\; \hat{c} = (x,y,z,t+\tau)$

Рисунок 1 Разностный шаблон

Рисунок 2 Параллилепипед с центром i, j, k

Ячейки представлены прямоугольными параллелипипедами, которые могут быть заполненными, пустыми или частично заполненными.

Заполненность ячеек: Центры ячеек и расчетные узлы сетки разнесены на $\frac{h_x}{2}, \frac{h_y}{2}, \frac{h_z}{2}$, по координатным направлениям x, y, z соответственно.

Обозначим $O_{i,j,k}$ - степень заполненности объемной ячейки.

Рисунок 3 Вершины объемной ячейки

Получается, что окрестными ячейками узла i, j, k являются 8 ячеек (см. рисунок 2).

Обозначим эти ячейки через координаты главных диагоналей (т. к. ячейки - это прямоугольные параллелепипеды).

Внизу:
1) $(i-1, j+1, k-1)$ - (i, j, k)
2) $(i-1, j, k-1)$ - $(i, j-1, k)$
3) $(i, j, k-1)$ - $(i+1, j-1, k)$
4) $(i, j+1, k-1)$ - $(i+1, j, k)$

Вверху:
1) $(i-1, j+1, k)$ - $(i, j, k+1)$
2) $(i-1, j, k)$ - $(i, j-1, k+1)$
3) (i, j, k) - $(i+1, j-1, k+1)$
4) $(i, j+1, k)$ - $(i+1, j, k+1)$

Читай метод конечных объемов (Рояк)

Для описания геометрии расчетного объема введем коэффициенты $q_0, q_1, q_2, q_3, q_4, q_5, q_6$ заполненности контрольных "объемов"ячейки (i, j, k).

Значение q_0 характеризует степень заполненности объема V_0.

$$q_0 - V_0 : x \in (x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}), y \in (y_{j-\frac{1}{2}}, y_{j+\frac{1}{2}}), z \in (z_{k-\frac{1}{2}}, z_{k+\frac{1}{2}})$$

$$q_6 - V_1 : x \in (x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}), y \in (y_{j-\frac{1}{2}}, y_{j+\frac{1}{2}}), z \in (z_{k-\frac{1}{2}}, z_k)$$

$$q_5 - V_2 : x \in (x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}), y \in (y_{j-\frac{1}{2}}, y_{j+\frac{1}{2}}), z \in (z_k, z_{k+\frac{1}{2}})$$

$$q_2 - V_3 : x \in (x_{i-\frac{1}{2}}, x_i), y \in (y_{j-\frac{1}{2}}, y_{j+\frac{1}{2}}), z \in (z_{k-\frac{1}{2}}, z_{k+\frac{1}{2}})$$

$$q_1 - V_4 : x \in (x_i, x_{i+\frac{1}{2}}), y \in (y_{j-\frac{1}{2}}, y_{j+\frac{1}{2}}), z \in (z_{k-\frac{1}{2}}, z_{k+\frac{1}{2}})$$

$$q_4 - V_5 : x \in (x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}), y \in (y_{j-\frac{1}{2}}, y_j), z \in (z_{k-\frac{1}{2}}, z_{k+\frac{1}{2}})$$

$$q_3 - V_6 : x \in (x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}), y \in (y_j, y_{j+\frac{1}{2}}), z \in (z_{k-\frac{1}{2}}, z_{k+\frac{1}{2}})$$

Будем называть Ω заполненные части объемов V_m, где $m = \overline{0...6}$. Таким образом, коэффициенты g_m вычисляются по формулам:

$$(q_0)_{i,j,k} = \frac{O_{i,j,k} + O_{i+1,j,k} + O_{i,j+1,k} + O_{i+1,j+1,k} + O_{i,j,k+1} + O_{i+1,j,k+1} + O_{i,j+1,k+1} + O_{i+1,j+1,k+1}}{8};$$

$$(q_6)_{i,j,k} = \frac{O_{i,j,k+1} + O_{i+1,j,k+1} + O_{i,j+1,k+1} + O_{i+1,j+1,k+1}}{4};$$

$$(q_5)_{i,j,k} = \frac{O_{i,j,k} + O_{i+1,j,k} + O_{i,j+1,k} + O_{i+1,j+1,k}}{4};$$

$$(q_2)_{i,j,k} = \frac{O_{i,j,k+1} + O_{i,j+1,k} + O_{i,j,k+1} + O_{i,j+1,k+1}}{4};$$

$$(q_1)_{i,j,k} = \frac{O_{i+1,j,k} + O_{i+1,j+1,k} + O_{i+1,j,k+1} + O_{i+1,j+1,k+1}}{4};$$

$$(q_4)_{i,j,k} = \frac{O_{i,j,k} + O_{i+1,j,k} + O_{i,j,k+1} + O_{i+1,j,k+1}}{4};$$

$$(q_3)_{i,j,k} = \frac{O_{i,j+1,k} + O_{i+1,j+1,k} + O_{i,j+1,k+1} + O_{i+1,j+1,k+1}}{4};$$

Проинтегрируем по объему Ω_0 уравнение (2), воспользуемся свойством линейности интеграла, в результате чего получим:

$$\iiint\limits_{\Omega_0} \frac{\hat{c}-c}{\tau}\,dxdydz+\iiint\limits_{\Omega_0} u\bar{c}'_x\,dxdydz+\iiint\limits_{\Omega_0} v\bar{c}'_y\,dxdydz+\iiint\limits_{\Omega_0} w\bar{c}'_z\,dxdydz =$$

$$\iiint\limits_{\Omega_0} (\mu\bar{c}'_x)'_x\,dxdydz+\iiint\limits_{\Omega_0} (\mu\bar{c}'_y)'_y\,dxdydz+\iiint\limits_{\Omega_0} (\mu\bar{c}'_z)'_z\,dxdydz+\iiint\limits_{\Omega_0} f\,dxdydz \tag{4}$$

Вычислим отдельно каждый из полученных интегралов.

$$\iiint\limits_{\Omega_0} \frac{\hat{c}-c}{\tau}\,dxdydz \simeq (q_0)_{i,j,k}\iiint\limits_{V_0} \frac{\hat{c}-c}{\tau}\,dxdydz = (q_0)_{i,j,k}\frac{\hat{c}-c}{\tau}h_xh_yh_z \tag{5}$$

Второй интеграл в формуле (4) принимает вид:

$$\iiint\limits_{\Omega_0} u\bar{c}'_x\,dxdydz \simeq \iiint\limits_{\Omega_1} u\bar{c}'_x\,dxdydz + \iiint\limits_{\Omega_2} u\bar{c}'_x\,dxdydz$$

$$= (q_1)_{i,j,k}\iiint\limits_{V_1} u\bar{c}'_x\,dxdydz + (q_2)_{i,j,k}\iiint\limits_{V_2} u\bar{c}'_x\,dxdydz$$

Вычислим интегралы по V_1 и V_2:

$$\iiint\limits_{V_2} u\bar{c}'_x\,dxdydz = \int\limits_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int\limits_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} dy \int\limits_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_i} u\bar{c}'_x dx \simeq u_{i-\frac{1}{2},j,k}\frac{\bar{c}_{i,j,k}-\bar{c}_{i-1,j,k}}{2}h_yh_z$$

$$\iiint\limits_{V_1} u\bar{c}'_x\,dxdydz = \int\limits_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int\limits_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} dy \int\limits_{x_i}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u\bar{c}'_x dx \simeq u_{i+\frac{1}{2},j,k}\frac{\bar{c}_{i+1,j,k}-\bar{c}_{i,j,k}}{2}h_yh_z$$

Следовательно,

$$\iiint\limits_{\Omega_0} u\bar{c}'_x\,dxdydz = (q_2)_{i,j,k}u_{i-\frac{1}{2},j,k}\frac{\bar{c}_{i,j,k}-\bar{c}_{i-1,j,k}}{2}h_yh_z+(q_1)_{i,j,k}u_{i+\frac{1}{2},j,k}\frac{\bar{c}_{i+1,j,k}-\bar{c}_{i,j,k}}{2}h_yh_z, \tag{6}$$

где

$$u_{i+\frac{1}{2},j,k} = \frac{u_{i+1,j,k}+u_{i,j,k}}{2};$$

$$u_{i-\frac{1}{2},j,k} = \frac{u_{i-1,j,k}+u_{i,j,k}}{2};$$

Аналогично вычислим

$$\iiint\limits_{\Omega_0} v\bar{c}'_y\,dxdydz = \iiint\limits_{\Omega_3} v\bar{c}'_y\,dxdydz + \iiint\limits_{\Omega_4} v\bar{c}'_y\,dxdydz$$

$$= (q_5)_{i,j,k}\iiint\limits_{V_3} v\bar{c}'_y\,dxdydz + (q_4)_{i,j,k}\iiint\limits_{V_4} v\bar{c}'_y\,dxdydz =$$

$$(q_4)_{i,j,k}\int\limits_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}}dz\int\limits_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}}dx\int\limits_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_j} v\bar{c}'_y dy + (q_3)_{i,j,k}\int\limits_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}}dz\int\limits_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}}dx\int\limits_{y_j}^{y+\frac{1}{2}} v\bar{c}'_y dy =$$

$$(q_4)_{i,j,k}v_{i,j-\frac{1}{2},k}\frac{\bar{c}_{i,j-1,k}+\bar{c}_{i,j,k}}{2}h_xh_z + (q_3)_{i,j,k}v_{i,j+\frac{1}{2},k}\frac{\bar{c}_{i,j+1,k}+\bar{c}_{i,j,k}}{2}h_xh_z,$$

где

$$v_{i,j+\frac{1}{2},k} = \frac{v_{i,j+1,k}+v_{i,j,k}}{2};$$

$$v_{i,j-\frac{1}{2},k} = \frac{v_{i,j-1,k}+v_{i,j,k}}{2};$$

Аналогично вычислим:

$$\iiint\limits_{\Omega_0} w\bar{c}'_x\,dxdydz = \iiint\limits_{\Omega_5} w\bar{c}'_x\,dxdydz + \iiint\limits_{\Omega_6} w\bar{c}'_x\,dxdydz =$$

$$(q_5)_{i,j,k}\iiint\limits_{V_5} w\bar{c}'_z\,dxdydz + (q_6)_{i,j,k}\iiint\limits_{V_6} w\bar{c}'_z\,dxdydz =$$

$$(q_6)_{i,j,k}\int\limits_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} dy \int\limits_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} dx \int\limits_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_k} w\bar{c}'_z dz + (q_5)_{i,j,k}\int\limits_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} dy \int\limits_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} dx \int\limits_{z_k}^{z_{k+\frac{1}{2}}} w\bar{c}'_z dz =$$

$$(q_6)_{i,j,k} w_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{\bar{c}_{i,j,k-\frac{1}{2}} + \bar{c}_{i,j,k}}{2} h_x h_y + (q_5)_{i,j,k} w_{i,j,k+\frac{1}{2}} \frac{\bar{c}_{i,j,k+\frac{1}{2}} + \bar{c}_{i,j,k}}{2} h_x h_y,$$

где

$$w_{i,j,k+\frac{1}{2}} = \frac{w_{i,j,k+1} + w_{i,j,k}}{2};$$

$$w_{i,j,k-\frac{1}{2}} = \frac{w_{i,j,k-1} + w_{i,j,k}}{2};$$

Вычислим интеграл, стоящий в правой части формулы (1):

$$\iiint\limits_{\Omega_0} (\mu\bar{c}'_x)'_x\,dxdydz = \iiint\limits_{\Omega_1} (\mu\bar{c}'_x)'_x\,dxdydz + \iiint\limits_{\Omega_2} (\mu\bar{c}'_x)'_x\,dxdydz$$

Рассмотрим случай: $V_{\Omega 1} > V_{\Omega 2}$, выделим из Ω_1 фрагмент $\Omega_{1,2}$ смежный с областью Ω_2, при этом $V_{\Omega 2} = V_{\Omega 1,2}$

$$\iiint\limits_{\Omega_0} (\mu\bar{c}'_x)'_x\,dxdydz = \iiint\limits_{\Omega_1 \setminus \Omega_{1,2}} (\mu\bar{c}'_x)'_x\,dxdydz + \iiint\limits_{\Omega_{1,2} \cup \Omega_2} (\mu\bar{c}'_x)'_x\,dxdydz =$$

$$((q_1)_{i,j,k} - (q_2)_{i,j,k})\iiint\limits_{V_1} (\mu\bar{c}'_x)'_x\,dxdydz + (q_2)_{i,j,k}\iiint\limits_{V_0} (\mu\bar{c}'_x)'_x\,dxdydz$$

Вычислим инртеграл:

$$\iiint\limits_{V_0} (\mu\bar{c}'_x)'_x\,dxdydz = \int\limits_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int\limits_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} dy \int\limits_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} (\mu\bar{c}'_x)'_x dx = \int\limits_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int\limits_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} (\mu\bar{c}'_x)\Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} dy$$

Введем замену: $W = \mu \bar{c}'_x$

$$\int\limits_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int\limits_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} W \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} dy = \int\limits_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int\limits_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} (W_{i+\frac{1}{2}} - W_{i-\frac{1}{2}}) dy = (W_{i+\frac{1}{2}} - W_{i-\frac{1}{2}}) h_y h_z$$

Вычислим $W_{i+\frac{1}{2}}$ на отрезке $[x_{i+1}, x_i]$:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{W}{\mu} dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \bar{c}'_x dx$$

или

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} W \frac{1}{\mu} dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \bar{c}'_x dx,$$

следовательно, по теореме о среднем

$$W_{i+\frac{1}{2}} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{dx}{\mu} = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \bar{c}'_x dx,$$

следовательно, $W_{i+\frac{1}{2}}$ вычисляется в точке $x_{i+\frac{1}{2}}$, так как считаем, что функция $W(x)$ - линейная. В противном случае, это будет не середина отрезка $[x_{i+1}, x_i]$.

Поделим обе части равенства на $\int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{dx}{\mu}$ и получим:

$$W_{i+\frac{1}{2}} = \left(\int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{dx}{\mu} \right)^{-1} \cdot \int_{x_i}^{x_{i+1}} \bar{c}'_x dx,$$

проинтегрируем $\bar{c}'_x$ и получим

$$W_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\bar{c}_{i+1} - \bar{c}_i}{\int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{dx}{\mu}} = \frac{\bar{c}_{i+1} - \bar{c}_i}{\frac{1}{\mu_{i+\frac{1}{2}}} \int_{x_i}^{x_{i+1}} dx} = \frac{\bar{c}_{i+1} - \bar{c}_i}{\frac{1}{\mu_{i+\frac{1}{2}}} x \Big|_{x_i}^{x_{i+1}}} = \frac{\bar{c}_{i+1} - \bar{c}_i}{\frac{1}{\mu_{i+\frac{1}{2}}} (x_{i+1} - x_i)} = \mu_{i+\frac{1}{2}} \frac{\bar{c}_{i+1} - \bar{c}_i}{h_x},$$

где $h_x = x_{i+1} - x_i$.

Теперь вычислим $W_{i-\frac{1}{2}}$ на отрезке $[x_{i-1}, x_i]$.

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{W}{\mu} dx = \int_{x_{i-1}}^{x_i} \bar{c}'_x dx$$

Вычисления для $W_{i-\frac{1}{2}}$ выполняем аналогично, как для $W_{i+\frac{1}{2}}$. Поэтому получим:

$$W_{i-\frac{1}{2}} = \mu_{i-\frac{1}{2}} \frac{\bar{c}_i - \bar{c}_{i-1}}{h_x}$$

В результате получим:

$$\iiint\limits_{V_0} (\mu \bar{c}'_x)'_x \, dxdydz = (W_{i+\frac{1}{2}} - W_{i-\frac{1}{2}}) h_y h_z =$$

$$\left(\mu_{i+\frac{1}{2},j,k} \frac{(\bar{c}_{i+1,j,k} - \bar{c}_{i,j,k})}{h_x} - \mu_{i-\frac{1}{2},j,k} \frac{(\bar{c}_{i,j,k} - \bar{c}_{i-1,j,k})}{h_x} \right) h_y h_z$$

Вычислим интеграл по V_1: