

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

1.1 Постановка задачи

Уравнение диффузии-конвекции-реакции:

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

с граничными условиями:

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

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:

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

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.

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

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 Параллелепипед с центром i, j, k

Ячейки представлены прямоугольными параллелепипедами, 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:

$$\begin{aligned}
& \iiint_{\Omega_0} \frac{\hat{c} - c}{\tau} dx dy dz + \iiint_{\Omega_0} u \vec{c}'_x dx dy dz + \iiint_{\Omega_0} v \vec{c}'_y dx dy dz + \iiint_{\Omega_0} w \vec{c}'_z dx dy dz = \\
& \iiint_{\Omega_0} (\mu \vec{c}'_x)'_x dx dy dz + \iiint_{\Omega_0} (\mu \vec{c}'_y)'_y dx dy dz + \iiint_{\Omega_0} (\mu \vec{c}'_z)'_z dx dy dz + \iiint_{\Omega_0} f dx dy dz
\end{aligned} \tag{4}$$

Вычислим отдельно каждый из полученных интегралов.

$$\iiint_{\Omega_0} \frac{\hat{c} - c}{\tau} dx dy dz \simeq (q_0)_{i,j,k} \iiint_{V_0} \frac{\hat{c} - c}{\tau} dx dy dz = (q_0)_{i,j,k} \frac{\hat{c} - c}{\tau} h_x h_y h_z \tag{5}$$

Второй интеграл в формуле (4) принимает вид:

$$\begin{aligned}
\iiint_{\Omega_0} u \vec{c}'_x dx dy dz & \simeq \iiint_{\Omega_1} u \vec{c}'_x dx dy dz + \iiint_{\Omega_2} u \vec{c}'_x dx dy dz \\
& = (q_1)_{i,j,k} \iiint_{V_1} u \vec{c}'_x dx dy dz + (q_2)_{i,j,k} \iiint_{V_2} u \vec{c}'_x dx dy dz
\end{aligned}$$

Вычислим интегралы по V_1 и V_2 :

$$\iiint_{V_2} u \vec{c}'_x dx dy dz = \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} dy \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_i} u \vec{c}'_x dx \simeq u_{i-\frac{1}{2},j,k} \frac{\bar{c}_{i,j,k} - \bar{c}_{i-1,j,k}}{2} h_y h_z$$

$$\iiint_{V_1} u \vec{c}'_x dx dy dz = \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} dy \int_{x_i}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u \vec{c}'_x dx \simeq u_{i+\frac{1}{2},j,k} \frac{\bar{c}_{i+1,j,k} - \bar{c}_{i,j,k}}{2} h_y h_z$$

Следовательно,

$$\iiint_{\Omega_0} u \vec{c}_x dx dy dz = (q_2)_{i,j,k} u_{i-\frac{1}{2},j,k} \frac{\bar{c}_{i,j,k} - \bar{c}_{i-1,j,k}}{2} h_y h_z + (q_1)_{i,j,k} u_{i+\frac{1}{2},j,k} \frac{\bar{c}_{i+1,j,k} - \bar{c}_{i,j,k}}{2} h_y h_z, \quad (6)$$

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

$$\begin{aligned} \iiint_{\Omega_0} v \vec{c}_y dx dy dz &= \iiint_{\Omega_3} v \vec{c}_y dx dy dz + \iiint_{\Omega_4} v \vec{c}_y dx dy dz \\ &= (q_5)_{i,j,k} \iiint_{V_3} v \vec{c}_y dx dy dz + (q_4)_{i,j,k} \iiint_{V_4} v \vec{c}_y dx dy dz = \\ &= (q_4)_{i,j,k} \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} dx \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^y v \vec{c}_y dy + (q_3)_{i,j,k} \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} dx \int_{y_j}^{y+\frac{1}{2}} v \vec{c}_y dy = \\ &= (q_4)_{i,j,k} v_{i,j-\frac{1}{2},k} \frac{\bar{c}_{i,j-1,k} + \bar{c}_{i,j,k}}{2} h_x h_z + (q_3)_{i,j,k} v_{i,j+\frac{1}{2},k} \frac{\bar{c}_{i,j+1,k} + \bar{c}_{i,j,k}}{2} h_x h_z \end{aligned}$$