

# 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,  $\mu$  - горизонтальная проекция коэффициента диффузионного (турбулентного) обмена,  $\nu$  - 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  $\tau$  - 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  $\Omega$  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  $\Omega_0$  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

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

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:

$$\begin{aligned}
\iiint_{\Omega_0} w \vec{c}'_x dx dy dz &= \iiint_{\Omega_5} w \vec{c}'_x dx dy dz + \iiint_{\Omega_6} w \vec{c}'_x dx dy dz = \\
&= (q_5)_{i,j,k} \iiint_{V_5} w \vec{c}'_z dx dy dz + (q_6)_{i,j,k} \iiint_{V_6} w \vec{c}'_z dx dy dz = \\
&= (q_6)_{i,j,k} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} dy \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} dx \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_k} w \vec{c}'_z dz + (q_5)_{i,j,k} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} dy \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} dx \int_{z_k}^{z_{k+\frac{1}{2}}} w \vec{c}'_z dz = \\
&= (q_6)_{i,j,k} w_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{\bar{c}_{i,j,k-\frac{1}{2}} + \bar{c}_{i,j,k}}{2} h_x h_y + (q_5)_{i,j,k} w_{i,j,k+\frac{1}{2}} \frac{\bar{c}_{i,j,k+\frac{1}{2}} + \bar{c}_{i,j,k}}{2} h_x h_y,
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
w_{i,j,k+\frac{1}{2}} &= \frac{w_{i,j,k+1} + w_{i,j,k}}{2}, \\
w_{i,j,k-\frac{1}{2}} &= \frac{w_{i,j,k-1} + w_{i,j,k}}{2},
\end{aligned}$$

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

$$\iiint_{\Omega_0} (\mu \vec{c}'_x)'_x dx dy dz = \iiint_{\Omega_1} (\mu \vec{c}'_x)'_x dx dy dz + \iiint_{\Omega_2} (\mu \vec{c}'_x)'_x dx dy dz$$

Рассмотрим случай:  $V_{\Omega_1} > V_{\Omega_1}$ , выделим из  $\Omega_1$  фрагмент  $\Omega_{1,2}$  смежный с областью  $\Omega_2$ , при этом  $V_{\Omega_2} = V_{\Omega_{1,2}}$

$$\begin{aligned}
\iiint_{\Omega_0} (\mu \vec{c}'_x)'_x dx dy dz &= \iiint_{\Omega_1 \setminus \Omega_{1,2}} (\mu \vec{c}'_x)'_x dx dy dz + \iiint_{\Omega_{1,2} \cup \Omega_2} (\mu \vec{c}'_x)'_x dx dy dz = \\
&= ((q_1)_{i,j,k} - (q_2)_{i,j,k}) \iiint_{V_1} (\mu \vec{c}'_x)'_x dx dy dz + (q_2)_{i,j,k} \iiint_{V_0} (\mu \vec{c}'_x)'_x dx dy dz
\end{aligned}$$

Вычислим интеграл:

$$\iiint_{V_0} (\mu \vec{c}'_x)'_x dx dy dz = \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} dy \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} (\mu \vec{c}'_x)'_x dx = \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} (\mu \vec{c}'_x) \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} dy$$

Введем замену:  $W = \mu \bar{c}'_x$

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

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