aboba

# Оглавление

Вве	едение	•								•				•		ć
1	Построение математической модели	1	 •					•		•					•	4
1.1	Постановка задачи	•	 •				•	•		•				•	•	4
1.2	Формализация			•	•	•		•	٠		•					4
1.3	Построение модели							•		•				•	•	5
2	Анализ математической модели .		 •												•	Ć
3	Вычислительные эксперименты .		 •		•										•	10
3.1	Программа для ЭВМ		 •												•	10
3.2	Явная схема (explicit)		 •												•	10
3.3	Неявная схема (implicit)							•		•		•		•		11
3.4	Схема «вверх по потоку» (upwind)						•	•		•	•	•		•		13
4	Заключение							•		•		•		•		15
Спі	исок использованных источников	•														16

#### Введение

Одними из важных процессов в мире являются течения в жидких средах. Они переносят вещества из одной точки в другую.

Но для рассмотрения механизма переноса, уменьшим масштаб. Кроме того, будем рассматривать перенос вещества, задаваемый возмущением в начальный момент времени. Уловимся, что возмущение направлено в одну сторону и имеет начальную скорость.

Целью работы является построение и анализ модели одномерного уравнения переноса.

## 1 Построение математической модели

### 1.1 Постановка задачи

Цель работы:

- Сформулировать модель одномерного переноса.
- Выбрать схемы решения.
- Провести численные эксперименты с различными методами аппроксимайции, для понимания их влияния на решение.
  - Провести анализ решений.

Дано:

- -x координата одномерного пространства,
- -t время,
- -u(x,t) функция, задающая концентрацию вещества в любой момент времени (удельная масса или энергия (отнесенная к единице объема). Для вывода формулы будем полагать, что работа происходит в трехмерном пространстве.
  - -v скорость переноса (const),
  - -f(x,t) описывает источники и стоки,

#### 1.2 Формализация

Будем рассматривать задачу для линейного уравнения переноса. Для аппроксимации будем использовать три метода: явная, неявная схемы и схему вверх по потоку.

#### 1.3 Построение модели

Рассмотрим газовую или жидкую сплошную среду. Примем: все точки среды находятся в неравновесном состоянии. Это приводит к возникновению полей концентраций, температур, давлений, а наличие градиентов этих параметров вызывает перенос массы и энергии.

Выделим элемент объема движущейся жидкости в неоднородном поле некоторого потенциала переноса. Под потенциалом переноса u понимают удельную массу или энергию (отнесенную к единице объема). u(x,y,z,t) - скалярная величина.

Известно, что скалярная функция u называется потенциалом вектороной функции  $\vec{q}$ , если между ними существует связь вида [1]:

$$\vec{q} = -\nabla u.$$

Далее будем рассматривать связь, как пропорциональность.

Таким образом, поток переносимой субстанции (массы или энергии) является векторной величиной  $\vec{q}$ . В случае переноса массы под потенциалом переноса u обычно понимают концентрацию компонента в смеси.

В рассматриваемой среде могут существовать, так называемые, объемные (непрерывно распределенные по объему) источники или стоки массы и энергии. В химической технологии под ними подразумеваются химические превращения.

Известно, что процессы тепло- и массообмена осуществляются двумя основными механизмами: молекулярным и конвективным. Молекулярный перенос (диффузия, теплопроводность) возникает в результате стремления системы к термодинамическому равновесию, а конвективный вызывается наличием поля скоростей в жидком или газовом объеме V.

Следует отметить, что в случае переноса энергии в форме теплоты существует ещѐ и радиантный перенос (тепловое излучение), вклад которого учитывают при достаточно высоких температурах.

Процессы молекулярного переноса массы и энергии описываются соответствующими феноменологическими уравнениями, являющимися, как правило, линейными градиентными законами.

Опуская доказательство, изложенное в [1], можно сделать вывод: в случае молекулярного и конвективного переноса общая плотность потока массы или энергии складывается из двух векторных величин:

$$\vec{q} = \vec{q}_M + \vec{q}_K,$$

где  $\vec{q}_M$  - векторная величина молекулярного переноса,  $\vec{q}_K$  - векторная величина конвективного переноса.

В газовой или жидкой среде, находящейся в движении, выделим произвольный объем V, ограниченный поверхностью A. На поверхности

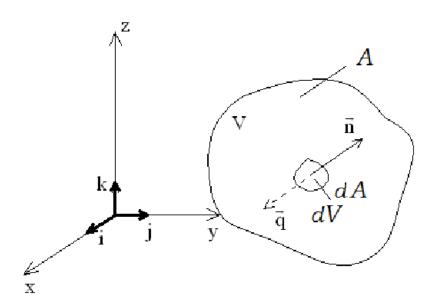


Рисунок 1 — Объём серды, ограниченный поверхностью A

A выделим элемент поверхности d и представим его в векторной форме, умножив на единичный вектор  $\vec{n}$ , нормальный к этому элементу и направленный из объема,  $\vec{n}dA = d\vec{A}$ .

Составим балансовое уравнение:

Накопление внутри объёма = вход - выход + образование.

Примем, что в произвольном объеме нет источников субстанции или стоков, т.е. образование равно нулю.

Плотность потока субстанции через площадку  $d\vec{A}$  будет  $-\vec{q}d\vec{A}$ . Знак минут интвертирует потоки (входные становятся положительными, а выходящие - отрицательными).

Результирующий поток будет равен:

$$-\iint_{A} \vec{q} d\vec{A}. \tag{1}$$

Физически этот интеграл представляет разницу между входящими и выходящими потоками субстанции через всю поверхность A.

Если в объёме V происходит накопление субстанции, то это вызовет изменение потенциала переноса во времени  $\frac{du}{dt}$ , которое для элементарного объёма  $\mathrm{dV}$  можно представить как  $\frac{du}{dt}dV$ , а для всего объема V как интеграл:

$$M = \iiint_{V} \frac{du}{dt} dV. \tag{2}$$

Приравняв выражения (1) и (2), получим:

$$-\iint_{A} \vec{q} d\vec{A} = \iiint_{V} \frac{du}{dt} dV. \tag{3}$$

Согласно теореме Остроградского-Гаусса [2], дающей преобразование интеграла, взятого по объёму V, ограниченному поверхностью A, в интеграл, взятый по этой поверхности, будем иметь:

$$\iint_{A} \vec{q} d\vec{A} = \iiint_{V} \operatorname{div} \vec{q} dV. \tag{4}$$

С учётом (3), соотношение (4) примет вид:

$$\iiint_V \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{q}\right) dV.$$

Интеграл, взятый по произвольному объему, может быть равен нулю только в случае равенства нулю подынтегральной функции:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{q} = 0.$$

Полученное выражение есть основное дифференциальное уравнение переноса субстанции – массы или энергии.

Перепишем его для одномерной задачи:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} = f(x, t). \tag{5}$$

Также установим начальные и граничные условия:

$$u(0,t) = \psi(t), \ u(x,0) = \phi(x)$$
 (6)

Таким образом, из (5) и (6) получаем систему:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} = f(x,t) \\ u(x,0) = \phi(x) \\ u(0,t) = \psi(t) \end{cases}$$
 (7)

## 2 Анализ математической модели

Система (7) является системой обыкновенного дифференциального уравнения в частных производных. Для численного решения применяется методы конечных разностей[3]. Введём равномерную сетку:

$$x_i = i\Delta x$$
,  $t^j = j\Delta t$ ,  $i = 0, \dots, N_x$ ,  $j = 0, \dots, N_t$ ,

где 
$$\Delta x = \frac{L}{N_x}$$
,  $\Delta t = \frac{T}{N_t}$ . Обозначим  $u_i^j = u(x_i, t^j)$  и  $f_i^i = f(x_i, t^i)$ .

Будем рассматривать три схемы решения: явную[3], неявную[3] и "вверх по потоку"[4]. Для простоты используем нулевые граничные условия и равномерную среду  $(f_i^j = 0)$ . Скорость v примем 1. Расстояние L равняется 5. Соответственно, максимальное значение времи тоже равно 5. Шаг по пространству возьмём 0.05, а по времени - 0.001. Такой выбор удовлетворяет условиям устойчивости всех трёх методов (8 - 9) и не требует больших вычислительных ресурсов.

## 3 Вычислительные эксперименты

### 3.1 Программа для ЭВМ

В качестве языка программирования для рассчётов и визуализации был выбран Python с использованием библиотек numpy (вычисления) и matplotlib (визуализация).

## 3.2 Явная схема (explicit)

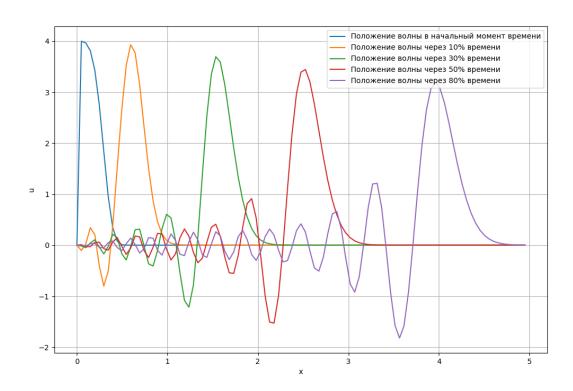


Рисунок 2 — Результат решения явной схемы.

Явная схема использует аппроксимацию по пространству и времени на текущем слое. Дифференциальное уравнение заменяется на:

$$\frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\Delta t} + v \frac{u_{i+1}^j - u_{i-1}^j}{2\Delta x} = f_i^j.$$

Рекуррентная формула для вычисления значений:

$$u_i^{j+1} = u_i^j - \frac{v\Delta t}{2\Delta x} \left( u_{i+1}^j - u_{i-1}^j \right),$$

Для устойчивости явной схемы необходимо выполнение условия Куранта[3]:

$$\boxed{\frac{v\Delta t}{2\Delta x} \leqslant \frac{1}{2}}. (8)$$

```
1
   def explicit (uu, v, dx, dt):
2
       m = uu.shape[0] - 1
       n = uu.shape[1] - 1
3
4
       u = uu.copy()
       k = v * dt / (2 * dx)
5
6
       for ti in range (m):
7
            for j in range (1, n):
8
                u [ti + 1, j] = u [ti, j] - k * (u [ti, j + 1] - u [ti, j - 1])
9
10
           u [ti + 1, 0] = u [ti, 0]
11
12
           u [ti + 1, n] = u [ti, n]
13
14
       return u
```

Из представленного графика решений (рис. 2) видно, присутствующий нисходящий тренд максимальных значений. При этом, с увеличением расстояния, пройденного волной, возникают осцилляции, с левой стороны, которые создают отрицательные значения, не имеющие физического смысла и являющиеся одним из недостатков данной схемы решения.

Осцилляции возникают из-за дисперсионных ошибок, вызванных тем, что схема не подавляет высокочастотные компоненты и не учитывает направление переноса. Это фундаментальное ограничение центральных схем подобного рода.

## 3.3 Неявная схема (implicit)

В неявной схеме производные аппроксимируются на следующем временном слое, что обеспечивает безусловную устойчивость:

$$\frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\Delta t} + v \frac{u_{i1}^j - u_{i-1}^j}{\Delta x^2} = f_i^j.$$

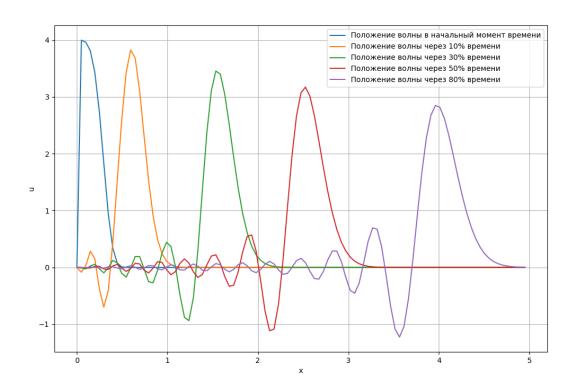


Рисунок 3 — Результат решения неявной схемы.

Результирующее уравнение можно переписать в виде линейной системы для каждого временного слоя:

$$-ku_{i-1}^{j+1} + u_i^{j+1} + ku_{i+1}^{j+1} = u_i^j + \Delta t \cdot f_i^j,$$

где 
$$k = \frac{v\Delta t}{\Delta x}$$
.

Система уравнений имеет трёхдиагональную структуру и может быть решена методом прогонки (TDMA).

```
\mathbf{def}\ \mathrm{TDMA}(\,\mathrm{a}\,,\ \mathrm{b}\,,\ \mathrm{c}\,,\ \mathrm{f}\,):
1
2
          a, b, c, f = \mathbf{tuple}(\mathbf{map}(\mathbf{lambda} \ k\_list: \ \mathbf{list}(\mathbf{map}(\mathbf{float}, \ k\_list))), (a, c,
               b, f)))
          alpha = [-b[0] / c[0]]
3
          beta = [f[0] / c[0]]
4
          n = len(f)
5
6
          x = [0] * n
7
          for i in range (1, n):
                denom = a[i] * alpha[i - 1] + c[i]
8
                alpha.append(-b[i] / denom)
9
                beta.append((f[i] - a[i] * beta[i - 1]) / denom)
10
          x[n-1] = beta[n-1]
11
```

```
12
        for i in range (n - 1, 0, -1):
            x[i - 1] = alpha[i - 1] * x[i] + beta[i - 1]
13
14
        return x
15
16
   def implicit (uu, v, dx, dt):
17
       m = uu.shape[0] - 1
18
19
        n = uu.shape[1] - 1
20
       u = uu.copy()
        k = v * dt / (2 * dx)
21
        for ti in range (m):
22
            al = np.zeros(n + 1)
23
            bl = np.ones(n + 1)
24
            cl = np. zeros(n + 1)
25
26
            al[1:-1] = -k
27
            cl[1:-1] = k
            bl[0] = bl[-1] = 1
28
            u [ti + 1] = TDMA(al, bl, cl, u [ti])
29
30
        return u
```

Рассмотрим графики решений системы (рис. 3). В данной схеме также виден нисходящий тренд максимумов волн. И также присутствую осцилляции, хотя и меньшие по амплитуде.

## 3.4 Схема «вверх по потоку» (upwind)

Схема «вверх по потоку» использует одностороннюю аппроксимацию производной по пространству:

$$\frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\Delta t} + v \frac{u_i^j - u_{i-1}^j}{\Delta x} = f_i^j.$$

Выражая  $u_i^{j+1}$ :

$$u_i^{j+1} = u_i^j + \frac{v\Delta t}{\Delta x} \left( u_{i-1}^j - u_i^j \right),$$

Схема стабильна при выполнении условия (критерий CFL (Курант-Фридриха-Леви)[4]:

$$\boxed{\frac{v\Delta t}{\Delta x} \leqslant 1}.\tag{9}$$

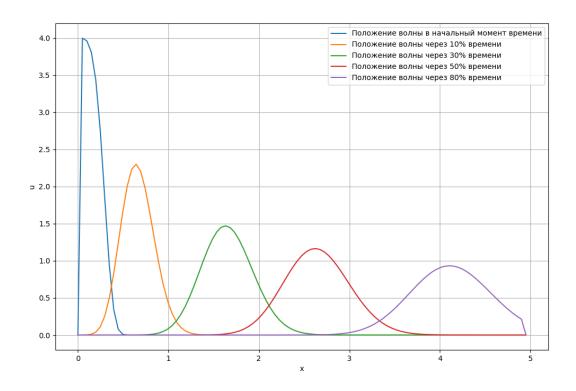


Рисунок 4 — Результат решения схемы "вверх по потоку".

Из решения видно (рис. 4), что схема также позволяет получить нисходящий тренд максимумов волн. Но в отличии от предыдущих схем, не имеет осцилляций. В тоже время, изначальная форма волны не сохраняется и при перемещении расплывается, становясь шире и ниже.

Кроме этого, взятые интегралы плотности методом трапеций, показывают, что их значения сохраняются во всех трёх схемах. Это является показателем корректности решения поставленной задачи.

### 4 Заключение

Была сформулирована и проанализирована модель одномерного переноса в жидкости.

Представлена программа для ЭВМ, которая вычисляет решения задачи одномерного переноса с момощью трех схем аппроксимации: явной, неявной и вверх по потоку.

Были проведены численные эксперименты с использованием разных схем решения данной системы.

## Список использованных источников

- 1. Alonso, M. Physics / M. Alonso, E.J. Finn. Addison-Wesley, 1992.
- 2.  $\Phi$ ихтенгольц,  $\Gamma$ . M. Основы математического анализа: Учебник. Часть 1 /  $\Gamma$ . M.  $\Phi$ ихтенгольц. Учебники для вузов. Специальная литература. 10 изд. Лань, 2015. С. 448.
- 3.  $\mathit{Турчак},\ \mathit{Л}.\ \mathit{И}.$  Основы численных методов: Учебное пособие /  $\mathit{Л}.\ \mathit{И}.$  Турчак,  $\mathit{\Pi}.$  В. Плотников. 2 изд. ФИЗМАТЛИТ, 2003. С. 304.
- 4.  $\Pi amankap$ , C. B. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости / C. B.  $\Pi$ атанкар. Энергоатомиздат, 1984. C. 152.