

К АНАЛИЗУ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ ДЛЯ ДВУМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ДИФФУЗИИ-ПЕРЕНОСА

Гапеева Т.В., Компаниец Л.А.

(Красноярск)

Для двумерного уравнения диффузии-переноса распределения концентрации найдено аналитическое решение, в котором скорости переноса являются функциями пространственных координат. Начальное распределение концентрации представляло собой прямоугольный столбик. Для ряда известных разностных схем были проведены численные расчеты и эти расчеты хорошо иллюстрируют основные свойства разностных схем.

ON THE ANALYSIS DIFFERENCE SCHEMES FOR THE TWO-DIMENSIONAL EQUATION OF DIFFUSION- ADVECTIVE

Gapeyeva T.V., Kompaniets L.A.

(Krasnoyarsk)

For the two-dimensional advection-diffusion equation of concentration distribution the analytical solution in which speeds of the advection are functions of spatial coordinates is found. The initial concentration distribution has been taken as the rectangular column. The numerical calculations were carried out for a few difference schemes and these calculations illustrate the basic properties of difference schemes well.

1. Водные ресурсы – это один из наиболее важных видов ресурсов, без которых невозможно представить существование человеческого общества и которые ничем нельзя заменить. Поэтому изучение процессов, протекающих в водных системах, имеет большой практический интерес. Одной из важных задач в этой связи является изучение процесса распространения примеси (тепло, загрязнение, биота и т.д.). В общем случае это очень

сложная задача, так как речь идет о расчете в области сложной геометрии. Поэтому качество разностных схем, применяемых для расчетов этих задач, исследуется в более простых случаях.

Одним из таких случаев является распространение примеси в случае, когда все неизвестные функции зависят только от двух переменных (плоское течение) и расчетная область представляет собой прямоугольник.

2. Рассмотрим процесс распространения диффузии консервативной примеси T со скоростями u , w и коэффициентами диффузии K_x , K_z , описываемый уравнением

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + w \frac{\partial T}{\partial z} = K_x \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + K_z \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}, \quad (1)$$

где T – неизвестная функция переменных x и z , t ; u, w – известные функции переменных x, z и t ; K_x, K_z – постоянные коэффициенты диффузии вдоль осей Ox и Oz . В начальный момент времени задается распределение примеси $T(x, z, 0)$.

Для ряда математических моделей скорости распространения примеси удовлетворяют закону сохранения массы, выражаемому уравнением неразрывности:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0. \quad (2)$$

Математическая задача заключается в том, чтобы определить распространение примеси (температуры) в любой момент времени по заданным начальным данным. Очень часто методом решения таких уравнений является метод конечных разностей.

Проверка качества разностных схем, как правило, осуществляется на точных решениях уравнения (1) при $u = const$, $w = const$ и $K = K_x = K_z = const$ [1]. Предлагается исследовать качество разностных схем на более содержательном решении, когда $u = u(x, z)$ и $w = w(x, z)$.

Для этого зададим скорости $u = u(x, z)$ и $w = w(x, z)$ как частные производные от выражения:

$$\Phi = -0.5 * p * (x^2 + z^2) \quad u = \frac{\partial \Phi}{\partial z} = -p * z \quad w = -\frac{\partial \Phi}{\partial x} = p * x, \quad (3)$$

где p – параметр, регулирующий скорость перемещения примеси и положим $K = K_x = K_z = const$.

Отметим, что в книге [2] рассматривался случай переноса примеси со скоростями, определяемыми в соответствии с формулами (3) без диффузионных членов ($K = 0$).

Легко показать, что в этом случае процесс распространения концентрации примеси сводится к вращению начального распределения концентрации примеси вокруг начала системы координат с угловой скоростью p с одновременной диффузией этой концентрации с коэффициентом диффузии K .

В самом деле, рассмотрим уравнение (1) при $p=1$. Тогда, в соответствии с формулами (3), получим скорости движения примеси: $u = -z$ $w = x$.

Перейдем в систему координат, вращающуюся вокруг начала системы координат со скоростью 1:

При этом

$$T(x, z, t) = T(x', z', t'),$$

где $x' = x \cdot \cos t + z \cdot \sin t$, $z' = -x \cdot \sin t + z \cdot \cos t$, $t' = t$.

Тогда $x = x' \cos t - y' \sin t$, $z = x' \sin t + y' \cos t$.

и

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial T}{\partial t'} + \frac{\partial T}{\partial x'}(-x \cdot \sin t + z \cdot \cos t) + \frac{\partial T}{\partial z'}(-x \cdot \cos t - z \cdot \sin t)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial T}{\partial x'} \cos t - \frac{\partial T}{\partial z'} \sin t$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 T}{\partial x'^2} \cos^2 t - 2 \frac{\partial^2 T}{\partial x' \partial z'} \cos t \cdot \sin t + \frac{\partial^2 T}{\partial z'^2} \sin^2 t$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\partial T}{\partial x'} \sin t + \frac{\partial T}{\partial z'} \cos t$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = \frac{\partial^2 T}{\partial x'^2} \sin^2 t + 2 \frac{\partial^2 T}{\partial x' \partial z'} \sin t \cdot \cos t + \frac{\partial^2 T}{\partial z'^2} \cos^2 t$$

Исходное уравнение (1) переписывается следующим образом:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial T}{\partial x'}(-x \cdot \sin t + z \cdot \cos t) + \frac{\partial T}{\partial z'}(-x \cdot \cos t - z \cdot \sin t) -$$

$$-z \cdot \left(\frac{\partial T}{\partial x'} \cos t - \frac{\partial T}{\partial z'} \sin t\right) + x \left(\frac{\partial T}{\partial x'} \sin t + \frac{\partial T}{\partial z'} \cos t\right) = K \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z'^2}\right)$$

После приведения подобных членов получаем уравнение:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = K \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z'^2}\right) \quad (4)$$

Уравнение (4) показывает, что в случае u и w , определенных в соответствии с уравнениями (3), происходят 2 независимых процесса: вращение начальной концентрации вокруг начала системы координат и диффузия ее с коэффициентом K .

В частности, возьмем в качестве начальных данных для T распределение температуры, равное 1 внутри квадрата со стороной 4 и с центром в точке с координатами (2,0). Тогда точное решение задачи (1) определяется формулой

$$T = \frac{1}{4} \left(\frac{\operatorname{erf}(4 - x \cdot \cos(pt) + z \cdot \sin(pt))}{2\sqrt{Kt}} + \frac{\operatorname{erf}(x \cdot \cos(pt) - z \cdot \sin(pt))}{2\sqrt{Kt}} \right) \times$$

$$\times \left(\frac{\operatorname{erf}(2 - x \cdot \sin(pt) + z \cdot \cos(pt))}{2\sqrt{Kt}} + \frac{\operatorname{erf}(2 + x \cdot \cos(pt) + z \cdot \sin(pt))}{2\sqrt{Kt}} \right)$$

где $\operatorname{erf}(z) = z - \frac{z^3}{1 \cdot 3} + \frac{z^5}{2 \cdot 5} - \dots + (-1)^n \frac{z^{2n+1}}{n!(2n+1)}$ – функция ошибок.

На рис. 1 представлено точное решение задачи (1) на момент времени $t = 0.08$, при этом $K = 0.1$, $p = 10$.

Теперь решение, полученное по разностному алгоритму, может быть оценено путем сравнения с аналитическим решением.

3. Для исследования были взяты разностные схемы с явной аппроксимацией членов переноса (явная схема с разностями против потока, явная схема с центральными разностями, явная разностная схема, удовлетворяющая разностному аналогу «закона сохранения»), полунявная разностная схема с неявной аппроксимацией членов переноса по оси Oz . Разностный алгоритм реализовывался методом трехточечной прогонки (такие разностные схемы применяются в случае, если коэффициенты K_x и K_z имеют разный масштаб).

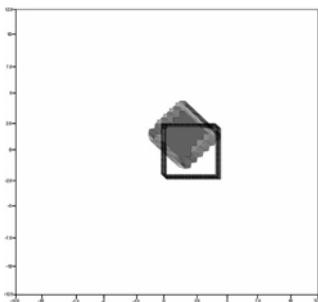


Рис. 1.

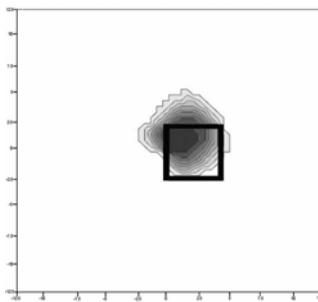


Рис. 2.

Были рассмотрены также 3 неявных безусловно устойчивых разностных схемы (неявная разностная схема с разностями против потока для аппроксимации членов переноса, неявная разностная схема, удовлетворяющая разностному аналогу «закона сохранения» и схема расщепления по координатам).

Разностная схема для уравнения (1) с разностями против потока для аппроксимации членов переноса имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
 & \frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\Delta t} + \begin{cases} u_{i,j} \frac{T_{i,j}^n - T_{i-1,j}^n}{\Delta x}, & \text{если } u_{i,j} \geq 0 \\ u_{i,j} \frac{T_{i+1,j}^n - T_{i,j}^n}{\Delta x}, & \text{если } u_{i,j} < 0 \end{cases} + \\
 & \begin{cases} w_{i,j} \frac{T_{i,j}^n - T_{i,j-1}^n}{\Delta z}, & \text{если } w_{i,j} \geq 0 \\ u_{i,j} \frac{T_{i,j+1}^n - T_{i,j}^n}{\Delta z}, & \text{если } w_{i,j} < 0 \end{cases} = \\
 & = K \left(\frac{T_{i+1,j}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{T_{i,j+1}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i,j-1}^n}{\Delta z^2} \right) \quad (5)
 \end{aligned}$$

Разностная схема для уравнения (1) с центральными разностями для аппроксимации членов переноса такова:

$$\frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\Delta t} + u_{i,j} \frac{T_{i+1,j}^n - T_{i-1,j}^n}{\Delta x} + w_{i,j} \frac{T_{i,j+1}^n - T_{i,j-1}^n}{\Delta z} = K \left(\frac{T_{i+1,j}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{T_{i,j+1}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i,j-1}^n}{\Delta z^2} \right) \quad (6)$$

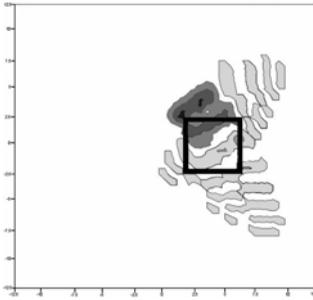


Рис. 3.

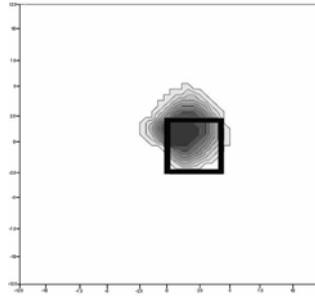


Рис. 4.

Разностная схема, удовлетворяющая разностному аналогу «закона сохранения», для уравнения (1) имеет вид:

$$\frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\Delta t} + \frac{(uT)_{i+\frac{1}{2}}^n - (uT)_{i-\frac{1}{2}}^n}{\Delta x} + \frac{(wT)_{j+\frac{1}{2}}^n - (wT)_{j-\frac{1}{2}}^n}{\Delta z} = K \left(\frac{T_{i+1,j}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{T_{i,j+1}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i,j-1}^n}{\Delta z^2} \right), \quad (7)$$

где $(uT)_{i+\frac{1}{2}}^n = \frac{1}{2} [(u_{i-\frac{1}{2}} + |u_{i-\frac{1}{2}}|) T_{i,j}^n + (u_{i+\frac{1}{2}} + |u_{i+\frac{1}{2}}|) T_{i+1,j}^n]$, $u_{i+\frac{1}{2}} = \frac{u_{i+1,j} + u_{i,j}}{2}$

$$(wT)_{j+\frac{1}{2}}^n = \frac{1}{2} [(w_{j-\frac{1}{2}} + |w_{j-\frac{1}{2}}|) T_{i,j}^n + (w_{j+\frac{1}{2}} + |w_{j+\frac{1}{2}}|) T_{i+1,j}^n],$$

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

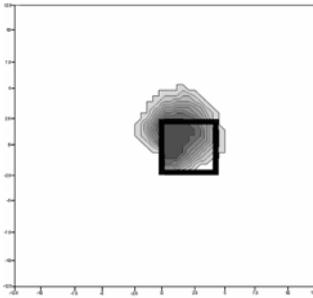


Рис. 5.

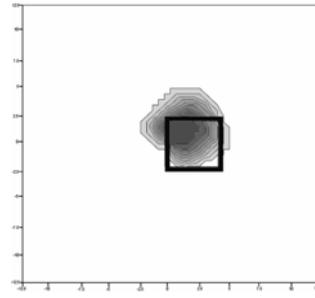


Рис. 6.

Была также рассмотрена разностная схема для уравнения (1) с неявной аппроксимацией членов переноса и диффузии по оси Oz . следующего вида:

$$\frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\Delta t} + \frac{(uT)_{i+\frac{1}{2}}^n - (uT)_{i-\frac{1}{2}}^n}{\Delta x} + \frac{(wT)_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} - (wT)_{j-\frac{1}{2}}^{n+1}}{\Delta z} = \left(\frac{T_{i+1,j}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{T_{i,j+1}^{n+1} - 2T_{i,j}^{n+1} + T_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta z^2} \right), \quad (8)$$

где $(wT)_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} = \frac{1}{2}[(w_{j-\frac{1}{2}} + |w_{j-\frac{1}{2}}|)T_{i,j}^{n+1} + (w_{j+\frac{1}{2}} + |w_{j+\frac{1}{2}}|)T_{i,j+1}^{n+1}]$

Две неявные разностные схемы для уравнения (1) отличаются только аппроксимацией членов переноса и реализуются с помощью метода простой итерации:

$$\begin{aligned} \frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\Delta t} + \begin{cases} u_{i,j} \frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x}, & \text{если } u_{i,j} \geq 0 \\ u_{i,j} \frac{T_{i+1,j}^{n+1} - T_{i,j}^{n+1}}{\Delta x}, & \text{если } u_{i,j} < 0 \end{cases} + \\ \begin{cases} w \frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta z}, & \text{если } w_{i,j} \geq 0 \\ w \frac{T_{i,j+1}^{n+1} - T_{i,j}^{n+1}}{\Delta z}, & \text{если } w_{i,j} < 0 \end{cases} = & \quad (9) \\ = K \left(\frac{T_{i+1,j}^{n+1} - 2T_{i,j}^{n+1} + T_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} + \frac{T_{i,j+1}^{n+1} - 2T_{i,j}^{n+1} + T_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta z^2} \right) \\ \frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\Delta t} + \frac{(uT)_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - (uT)_{i-\frac{1}{2}}^{n+1}}{\Delta x} + \frac{(wT)_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} - (wT)_{j-\frac{1}{2}}^{n+1}}{\Delta z} = K \left(\frac{T_{i+1,j}^{n+1} - 2T_{i,j}^{n+1} + T_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} + \frac{T_{i,j+1}^{n+1} - 2T_{i,j}^{n+1} + T_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta z^2} \right), & \quad (10) \end{aligned}$$

Схема расщепления для уравнения (1) записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{T_{i,j}^{n+1/2} - T_{i,j}^n}{\Delta t} = - \begin{cases} u_{i,j} \frac{T_{i,j}^{n+1/2} - T_{i-1,j}^{n+1/2}}{\Delta x}, & \text{если } u_{i,j} \geq 0 \\ u_{i,j} \frac{T_{i+1,j}^{n+1/2} - T_{i,j}^{n+1/2}}{\Delta x}, & \text{если } u_{i,j} < 0 \end{cases} \\ + K \frac{T_{i+1,j}^{n+1/2} - 2T_{i,j}^{n+1/2} + T_{i-1,j}^{n+1/2}}{\Delta x^2} \\ \frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^{n+1/2}}{\Delta t} = - \begin{cases} w_{i,j} \frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x}, & \text{если } w_{i,j} \geq 0 \\ w_{i,j} \frac{T_{i+1,j}^{n+1} - T_{i,j}^{n+1}}{\Delta x}, & \text{если } w_{i,j} < 0 \end{cases} \end{aligned}$$

$$+ K \frac{T_{i,j+1}^{n+1} - 2T_{i,j}^{n+1} + T_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta z^2} \quad (11)$$

Проведя расчеты с применением схем (5)-(11) на момент времени $t = 0.08$, $dx = dz = 0.5$, $dt = 0.002$, мы получили результаты, представленные на рис. 2-10.

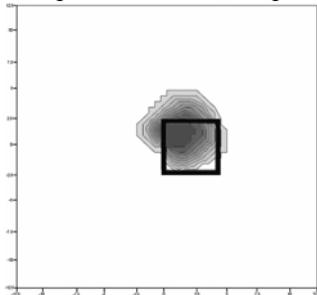


Рис. 7.

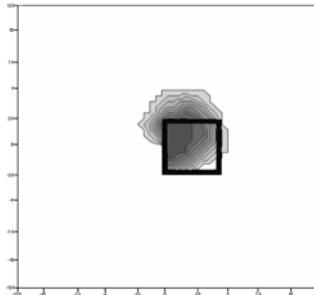


Рис. 8.

Из сравнения рисунков 1-10 видно, что в данном случае разностные схемы (5) и (7) дают совпадающие результаты, а немо- нотонная разностная схема (6) дает ярко выраженный осциллирующий след. Совпадение численных результатов для разностных схем (5) и (7) следует из того, что для рассмотренных скоростей u зависит только от z , а w зависит только от x . Отметим, что для других значений скорости u , w эти разностные схемы не совпадают. Так, если взять скорости $u = 10x - 10z$ и $w = 10x - 10z$, то получим результаты, представленные на рисунках 9 и 10. Рис. 9 изображает решение, рассчитанное по разностной схеме (5), а рис. 10 – по разностной схеме (7). Так что желательно было бы получить точное решение задачи (1) для случая, когда $u = u(x, z)$ и $w = w(x, z)$, т.к. только тогда можно увидеть различие в расчетах по этим разностным схемам.

Аналогично предыдущему можно доказать, что должны совпасть результаты, полученные для неявных безусловно устойчивых разностных схем (9) и (10), рис.6 и рис.7., в то время как разностная схема расщепления дает отличный от них результат, рис. 8.

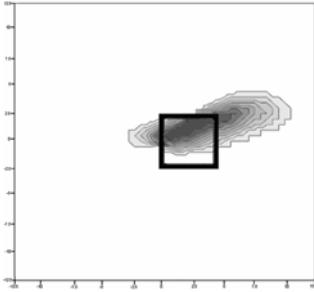


Рис. 9.

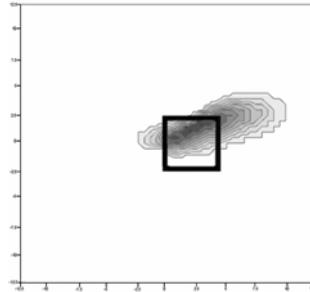


Рис. 10.

Также было бы желательно получить точное решение задачи (1) для случая, когда $K_x = 0$, так как достаточно часто в математических моделях распространения и диффузии примеси диффузией по одной из переменных пренебрегают [3].

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования РФ и CRDF, грант № REC-002.

Литература.

1. Yan Wu, Roger A.Falconer. A mass conservative 3-D numerical model for predicting solute fluxes in estuarine waters, *Advances in Water Resources*, 23, 2000, p 531-543.
2. К. Флетчер. Численные методы на основе метода Галеркина, М: Мир, 1988.
3. В.И.Квон. Гидротермический расчет водоемов-охладителей. *Известия Академии наук СССР, сер. Энергетика и транспорт*, № 5, 1979 г., стр. 129-137.