

УДК 519

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ПРИМЕСИ В ОДНОМЕРНОЙ СРЕДЕ

Т.Д. Саргазаков

Рассматривается разностный метод решения стационарного уравнения распределения концентрации примеси за счет диффузии, конвективного переноса и произвольных источников и стоков примеси в какой-либо среде. Проведены расчеты различных вариантов уравнения переноса с постоянными коэффициентами и потоковыми условиями на границах, выполнены сравнения с полученными точными решениями этих вариантов, которые показывают, что выбранная схема второго порядка аппроксимации хорошо согласуется с теорией.

Ключевые слова: численный метод; разностные схемы; консервативные и монотонные схемы; метод Гаусса решения СПАУ.

БИР ЧЕНЕМДҮҮ ЧӨЙРӨДӨ КОШУЛМАНЫН ӨТҮҮСҮН САНДЫК МОДЕЛДЕШТИРҮҮ

Т.Д. Саргазаков

Бул макалада диффузиянын, кандайдыр бир чөйрөдө кошулманын конвективдүү өтүүсү менен булактардын жана жоготуулардын эсебинен кошулманын концентрациясынын бөлүштүрүлүшүнүн стационардык тендемесин чыгаруунун ар кандай методдору каралган. Турактуу коэффициенттер жана чектерде агымдын шарттарын эске алуу менен өтүү тендемесинин ар түрдүү варианттарынын эсептөөлөрү келтирилген, алынган варианттардын жыйынтыктары так чыгарылыштары менен салыштырылган, тандалган экинчи даражадагы аппроксимациялык схеманын теория менен жакшы айкалышы көрсөтүлгөн.

Түйүндүү сөздөр: сандык метод; ар түрдүү схемалар; консервативдик жана монотондук схемалар; тендемени чыгаруу үчүн Гаусстун методу.

NUMERICAL MODELING OF MIXTURE TRANSFER IN A ONE-DIMENSIONAL MEDIA

T.D. Sargazakov

The article discusses the differential method for solving the stationary equation of distribution of the mixture concentration as the result of diffusion, convective transport, and arbitrary sources and channels of the mixture in any mediums. Various options of the transport equation with constant coefficients and flow conditions at the boundaries are calculated, and comparisons are made with the exact solutions obtained for these options which show that the selected second-order approximation scheme aligns well with the theory.

Keywords: numerical method; differential schemes; conservative and monotone schemes; Gauss method for solving SLAE.

Введение. Математически, стационарная задача диффузии и конвективного переноса примеси описывается следующим дифференциальным уравнением:

$$\frac{d}{dx} \left[k(x) \frac{du}{dx} \right] - \frac{d}{dx} (v(x)u) - r(x)u = \frac{d}{dx} \left[k \frac{du}{dx} \right] - v \frac{du}{dx} - r * u = -f(x), \quad (1)$$

где $u(x)$ – концентрация примеси; $k(x)$ – коэффициент диффузии; $v(x)$ – скорость переноса примеси в движущей среде (ветер); $r^* = r + \frac{dv}{dx}$, $r(x)$ и $f(x)$ – плотность стоков и источников примеси, соответственно (например, за счет химических реакций).

В свою очередь, коэффициенты k, v, r^* и f могут зависеть не только от координат x , но и от температуры u и градиента температуры $\frac{du}{dx}$. В этом случае уравнение (1) становится нелинейным. Математическая теория дает общее решение (1) только в случае постоянных коэффициентов, во всех остальных случаях можно с успехом пользоваться приближенными численными методами.

Чтобы получить частное решение задачи, необходимы два дополнительных условия на краях области x , т. е. в точках $x = a$ и $x = b$. Зададим потоковые условия:

$$-k \frac{du}{dx} + vu = \mu_1, \text{ при } x = a, \quad -k \frac{du}{dx} + vu = \mu_2, \text{ при } x = b, \quad (2)$$

где μ_1, μ_2 – потоки примеси на границах, заданные числа, причем поток считается положительным, если он направлен по оси x , в противном случае – отрицательным.

Выбор разностной схемы. Составим на задачу (1) и (2) разностную схему второго порядка аппроксимации и второго порядка точности $O(h^2)$, на равномерной сетке

$$\bar{\omega}_h = \left\{ x_i = a + ih, i = 0, 1, 2, \dots, N, h = \frac{b-a}{N} \right\}, \text{ где } N - \text{ количество точек деления отрезка } [a, b].$$

В результате все непрерывные функции от x нашей задачи заменятся на сеточные функции в узлах i , а искомая функция u – на u_i . Коэффициент диффузии k положителен, но может иметь внутри отрезка разрыв первого рода, например, в случае контакта двух разных сред.

Из теории известно, что при выборе разностной схемы для задачи (1), (2) с разрывными коэффициентами, лучше всего пользоваться интегро-интерполяционным методом или методом баланса [1]. Дифференциальное уравнение (1) есть в пределе интегральный закон сохранения материи. Поэтому, разумно строить разностную схему так, чтобы в каждом узле этот закон сохранения выполнялся, причем выполнялся и суммарный закон сохранения для всего отрезка $[a, b]$. Такие разностные схемы называют консервативными. Разностная схема в таком методе строится с помощью уравнения процесса в интегральном виде. Далее, для устойчивости член с u' в уравнении (1) нужно аппроксимировать односторонними разностными производными (правой u_x при $v > 0$ и левой u_x при $v < 0$) [2]. В этом случае получается монотонная схема, но с первым порядком аппроксимации, и это вызывает трудности из-за появления “схемной численной диффузии” [2]. Чтобы получить монотонную схему со вторым порядком аппроксимации [1, 3], можно ввести возмущенный коэффициент $\theta = \frac{1}{1+R}, R = \frac{h|v|}{2k}$ при

диффузионном члене в (1), т. е. аппроксимировать уравнение:

$$\theta(ku')' - vu' - r^*u = -f.$$

Положим $v(x)$ в виде суммы:

$$v = v^+ + v^-, v^+ = \frac{1}{2}(v + |v|) \geq 0, v^- = \frac{1}{2}(v - |v|) \leq 0,$$

и аппроксимируем vu' выражением:

$$(vu')_i = \left(\frac{v}{k} ku' \right)_i \approx b_i^+ a_{i+1} \frac{u_{i+1} - u_i}{h} + b_i^- a_i \frac{u_i - u_{i-1}}{h},$$

где $b_i^+ = \frac{v_i^+}{k_i}, b_i^- = \frac{v_i^-}{k_i}$. В результате мы получаем необходимую разностную схему [3]:

$$\frac{\theta_i}{h} \left(a_{i+1} \frac{y_{i+1} - y_i}{h} - a_i \frac{y_i - y_{i-1}}{h} \right) - b_i^+ a_{i+1} \frac{y_{i+1} - y_i}{h} - b_i^- a_i \frac{y_i - y_{i-1}}{h} - r_i^* y_i = -\varphi_i, \quad (3)$$

$$i = 1, 2, \dots, N-1,$$

где a_i и φ_i можно вычислять по формулам (4) и (6) соответственно, а коэффициент

$$r_i^* = \frac{1}{h} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left(r + \frac{dv}{dx} \right) dx \approx r_i + (v_{i+1/2} - v_{i-1/2}) / h \approx r_i + \frac{v_{i+1} - v_{i-1}}{2h},$$

где r_i определяется из (5).

Следуя [3], для внутренних узлов отрезка $[a, b]$, так как диффузионный поток $W(x) = k \frac{du}{dx}$, то $\frac{du}{dx} = \frac{W(x)}{k}$, и интегрирование этого равенства по x от x_{i-1} до x_i дает:

$$u_i - u_{i-1} = \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{W}{k(x)} dx \approx W_{i-1/2} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{dx}{k(x)} = \frac{W_{i-1/2}}{a_i} h, \quad \text{где } r_i = \frac{1}{h} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} r(x) dx. \quad (4)$$

Построение схемы с использованием интегрального уравнения переноса требует для коэффициентов в схеме (3) следующих приближений:

$$\frac{1}{h} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} r(x) U(x) dx \approx r_i y_i, \quad a_i = \left[\frac{1}{h} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{dx}{k(x)} \right]^{-1}, \quad (5)$$

$$\frac{1}{h} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f(x) dx \approx \varphi_i. \quad (6)$$

Схема (3) является монотонной и обладает вторым порядком аппроксимации во внутренних точках сетки $\bar{\omega}_h$. Теперь аппроксимируем краевые условия (2) со вторым порядком аппроксимации.

Для этого [3] воспользуемся интегральными уравнениями баланса в краевых ячейках $a \leq x \leq x_{1/2} = a + \frac{h}{2}$, и $x_{N-1/2} \leq x \leq x_N, x_{N-1/2} = x_N - \frac{h}{2}$, в итоге получим:

$$W_{1/2} - W_0 + (vu)_0 - (vu)_{1/2} - \int_{x_0}^{x_{1/2}} r u dx = - \int_{x_0}^{x_{1/2}} f(x) dx, \quad \text{для } x_0 \leq x \leq x_{1/2},$$

и

$$W_N - W_{N-1/2} + (vu)_{N-1/2} - (vu)_N - \int_{x_{N-1/2}}^{x_N} r u dx = - \int_{x_{N-1/2}}^{x_N} f(x) dx,$$

для $x_{N-1/2} \leq x \leq x_N$.

Заменяя u на сеточную функцию y_i , учитывая условия для потоков в граничных точках (2), что $W_0 + (vu)_0 = \mu_1$, и $-W_N + (vu)_N = \mu_2$, а также беря средние арифметические значения для $(vu)_{1/2} = (v_0 y_0 + v_1 y_1) / 2$, и $(vu)_{N-1/2} = (v_N y_N + v_{N-1} y_{N-1}) / 2$ и, рассчитывая приближенно интегралы, можно получить следующие разностные граничные условия:

$$y_0 = \tilde{\chi}_1 y_1 + \tilde{\mu}_1, \quad y_N = \tilde{\chi}_2 y_{N-1} + \tilde{\mu}_2, \quad (7)$$

где

$$\tilde{\chi}_1 = \frac{a_1/h - v_1/2 - RH_0}{a_1/h + v_0/2 + 3RH_0}, \quad \tilde{\mu}_1 = \frac{\mu_1 + FH_0}{a_1/h + v_0/2 + 3RH_0}, \quad (8)$$

и

$$\tilde{\chi}_2 = \frac{a_N/h + v_{N-1}/2 - RH_N}{a_N/h - v_N/2 + 3RH_N}, \quad \tilde{\mu}_2 = \frac{\mu_2 + FH_N}{a_N/h - v_N/2 + 3RH_N}. \quad (9)$$

При выводе (7), (8), (9) авторы использовали формулы (4) для получения $W_{1/2} = a_1 \frac{y_1 - y_0}{h}$, $W_{N-1/2} = a_N \frac{y_N - y_{N-1}}{h}$, а коэффициенты a_i во всех узлах схемы можно рассчитывать, по приближенному

интегрированию из (4), например, по формуле: $a_i = \frac{2k(x_i)k(x_{i-1})}{k(x_i) + k(x_{i-1})}$. Интегралы в граничных ячейках аппроксимируются обычными среднеарифметическими подынтегральными функциями:

$$\int_a^{x_1/2} rudx \approx (3r_0 + r_1)(3y_0 + y_1) \frac{h}{32} = RH_0(3y_0 + y_1), \quad \int_a^{x_1/2} f(x)dx \approx (3f(x_0) + f(x_1)) \frac{h}{8} = FH_0,$$

$$\int_{x_{N-1/2}}^{x_N} f(x)dx \approx (3f(x_N) + f(x_{N-1})) \frac{h}{8} = FH_N, \quad \int_{x_{N-1/2}}^{x_N} rudx \approx (3r_N + r_{N-1})(3y_N + y_{N-1}) \frac{h}{32} = RH_N(3y_N + y_{N-1}).$$

Уравнение (3) можно представить в виде трехточечной разностной схемы:

$$\tilde{A}_i y_{i-1} - \tilde{C}_i y_i + \tilde{B}_i y_{i+1} = -\varphi_i, \quad i = 1, 2, \dots, N-1,$$

где

$$\tilde{A}_i = \frac{\theta_i a_i}{h^2} + \frac{b_i^- a_i}{h}, \quad \tilde{C}_i = \frac{\theta_i a_{i+1}}{h^2} + \frac{\theta_i a_i}{h^2} - \frac{b_i^+ a_{i+1}}{h} + \frac{b_i^- a_i}{h} + r_i^*, \quad (10)$$

$$\tilde{B}_i = \frac{\theta_i a_{i+1}}{h^2} - \frac{b_i^+ a_{i+1}}{h}.$$

Условия монотонности у схемы (10) выполнены, и она имеет второй порядок аппроксимации внутри сетки $\bar{\omega}_h$ и на краях с условиями (7) и (8) и (9). Эта схема может быть решена методом прогонки [1].

Численные расчеты и сравнения с точными решениями. Примеры точных решений (1) с крайевыми условиями (2) мы будем брать с постоянными коэффициентами k, ν, r , а функция f для всех вариантов будет иметь вид: $f(x) = 5x - x^2 / 10$. Во всех вариантах коэффициент диффузии k внутри отрезка $[a, b]$ в точке ξ будет иметь разрыв первого рода. Точное решение в этих вариантах будет состоять из двух решений вида [4]:

$$u_i = C_{1i} e^{h_i x} + C_{2i} e^{b_i x} + a_i x^2 + b_i x + d_i, \quad (11)$$

где решение u_1 соответствует отрезку $[a, \xi]$, а u_2 – соответственно $[\xi, b]$. Простой подстановкой частного решения (квадратного трехчлена справа в (11)) в (1) дают нам неизвестные коэффициенты a_p, b_i и d_p , а четыре коэффициента C_{1i} и C_{2i} определяются из двух граничных условий (2), и двух условий сопряжения в точке ξ (функция u непрерывна в этой точке, и диффузионные потоки слева и справа в этой точке одинаковы). При этом получается система четырех линейных алгебраических уравнений с четырьмя неизвестными, которая решается методом Гаусса с выбором ведущего элемента. Все расчеты проведены в кодах VBA в системе EXCEL.

Таблица 1 – Варианты примеров для расчетов задачи (1) и (2) численно и аналитически

Вариант	[a, b]	N	ξ	$k_1, [a, \xi]$	$k_2, [\xi, b]$	ν	r	μ_1	μ_2
1	[0, 20]	20	10	5	10	3	6	5	7
2	[0, 20]	40	6	10	5	1	1	10	-5
3	[10, 50]	20	30	2	4	0.2	0.1	3	15
4	[10, 50]	20	20	5	3	0.3	0.2	15	5
5	[10, 50]	80	30	$x^2/100$	$x^2/200$	$0.1 \sin x + 0.5$	$(x/10)^{1/2}$	20	-20

В таблице 1 представлены все варианты для расчетов задачи (1) и (2) по разностной схеме (10), с крайевыми условиями (7), (8), (9) методом прогонки. Для вариантов 1–4 этих задач проведены точные решения, как отмечено выше. В таблице 2 показаны полученные коэффициенты точных решений для формулы (11), для вариантов 1–4 – на отрезке $[a, \xi]$. В таблице 3 – те же коэффициенты, для тех же вариантов, только для отрезка $[\xi, b]$. Полученные точные решения этих вариантов сопоставлены с проведенными по разностной схеме (10), с крайевыми условиями (7)–(9) методом прогонки численными решениями. Вариант 5 рассчитан только численно. Все эти результаты показаны на рисунках 1 и 2.

Таблица 2 – Коэффициенты точных решений для формулы (11), для вариантов 1–4 на отрезке $[a, \xi]$

Вариант	C_1	C_2	l_1	l_2	a_1	b_1	d_1
1	1.032E-07	1.477708	1.435782	-0.83578	-0.01667	0.85	-0.45278
2	-0.292838	18.48108	0.370156	-0.27016	-0.1	5.2	-7.2
3	-0.004972	135.0455	0.279129	-0.17913	-1	54	-148
4	-0.025688	251.6406	0.232237	-0.17224	-0.5	26.5	-64.75

Таблица 3 – Коэффициенты точных решений для формулы (11), для вариантов 1–4 на отрезке $[\zeta, b]$

Вариант	C_3	C_4	l_3	l_4	a_2	b_2	d_2
1	2.265E-08	122.3839	0.938987	-0.6389867	-0.01667	0.85	-0.48056
2	0.000449	-0.49439	0.558258	-0.3582576	-0.1	5.2	-6.2
3	0.0304689	645.9512	0.185078	-0.1350781	-1	54	-188
4	1.789E-05	-329.331	0.312996	-0.2129956	-0.5	26.5	-54.75

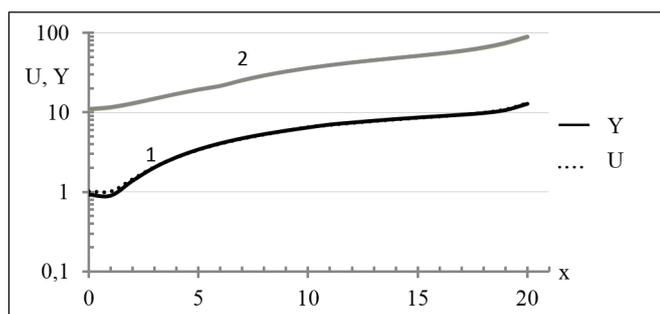


Рисунок 1 – Численные Y и аналитические U решения задачи (1), (2) для вариантов 1 и 2 таблицы 1

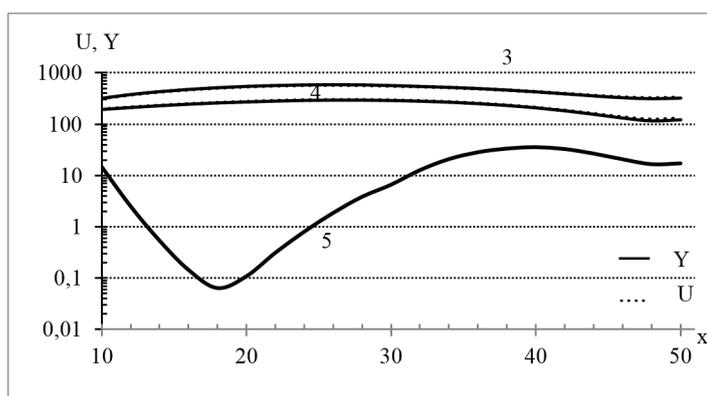


Рисунок 2 – Численные Y и аналитические U решения задачи (1), (2) для вариантов 3 и 4; 5 – численное решение варианта 5

Как видно на рисунках, выбранная схема довольно точно воспроизводит аналитические решения, даже при малых точках разбиения N . Поэтому, она может быть использована в решениях стационарных задач переноса примеси, например в атмосферных процессах. В варианте 5 функцией источника выбрана функция распределения Гаусса вида $f(x) = \frac{200}{\sqrt{2\pi}} e^{-(x-40)^2/50}$ с максимумом в точке $x = 40$. На ри-

сунке 2 для численного решения по варианту 5 видно, что концентрация примеси минимальна при $x = 18$, и максимальна при $x = 40$. Максимум обеспечивается двумя факторами: функция источника максимальна в этой точке ($f(40) = 79.8$), и примесь поступает в эту зону диффузионным потоком от правой границы. Поток примеси на левой границе направлен внутрь рассматриваемой зоны. Доминирующий диффузионный поток обеспечивается таким градиентом концентрации, что мы видим ее спад от $x = 10$ до $x = 18$. К тому же, функция источника в этой зоне очень мала ($f(18) = 0.0049$). Подъем концентрации при $x > 18$ обусловлен диффузионным потоком из зоны максимума концентрации, создавая необходимый градиент, несмотря на умеренное увеличение стока примеси. Разрыв в точке $x = \xi$ коэффициента диффузии вызывает смену значения производной функции U слева и справа от этой точки, что и видно на рисунке 2.

Стационарная задача распределения примеси может наблюдаться в случаях, когда характерное время стока примеси значительно выше характерного времени ее переноса, которое, в свою очередь, значительно больше времени наблюдения за объектом. Например, однородное распределение аэрозолей по высоте до высот 1,5 км, отмеченное в работе [5].

Литература

1. Самарский А.А. Теория разностных схем: учеб. пособие / А.А. Самарский. М.: Наука, 1977. 656 с.
2. Роуч П. Вычислительная гидродинамика / П. Роуч. М.: Мир, 1980. 616 с.
3. Саргазаков Т.Д. Численные методы решения математических задач в системе EXCEL для физиков: учеб. пособие / Т.Д. Саргазаков. Бишкек: ИЦ “Текник”, 2007. 73 с.
4. Корн Г. Справочник по математике для научных работников и инженеров / Г. Корн, Т. Корн. М.: Наука, 1984. 831 с.
5. Саргазаков Т.Д. Измерения приземных концентраций аэрозолей Иссык-Кульской котловины, их микроструктура и некоторые микрофизические характеристики / Т.Д. Саргазаков, Ш. Жусупкельдиев // Вестник КРСУ. 2017. Т. 17. № 12. С. 190–194.