Численное решение уравнения конвекции-диффузии на неструктурированных сетках[1]

В.В. Чуруксаева, А.В. Старченко

Томский государственный университет, Томск

Рассматривается разностная схема для решения нестационарного уравнения конвекции-диффузии на неструктурированных сетках. На основе полученного решения задачи о точечном источнике показаны преимущества использования неструктурированных сеток и корректность построенного численного метода.

Задачи расчета распространения загрязнителей в естественных средах часто возникают в различных прикладных науках. Но в силу того, что экспериментальное исследование сопряжено с рядом экономических и технологических трудностей, все чаще применяются возможности математического моделирования.

При моделировании процессов, протекающих в естественных условиях, геометрия рассматриваемой области, как правило, довольно сложна, потому предпочтительным становится использование неструктурированных сеток.

Одной из актуальных задач современных наук о Земле является изучение распространения выбросов в атмосферу или водоем от промышленных предприятий. Важной частью таких расчетов является решение конвективно-диффузионного уравнения.

В качестве приближения описанной проблемы рассмотрим задачу распространения в прямоугольной области $D = [0, L_x] \times [0, L_z]$ инертной примеси, выбрасываемой мгновенным источником, расположение и мощность которого известны.

Математически процесс переноса примеси определяется решением краевой задачи для нестационарного двумерного конвективно-диффузионного уравнения

[1] Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках государственного задания №2014/223 (код проекта 2382).

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + div\vec{\mathrm{I}} = S_\Phi; \quad \vec{\mathrm{I}} = \vec{V}\Phi - \Gamma grad\Phi,$$
$$S_\Phi = Q\delta(t-t_0)\delta(x-x_0)\delta(z-z_(\tag{1}$$

с начальными и граничными условиями

$$t = 0: \quad \Phi = 0;$$
$$x = 0: \ \Phi = 0; \quad x = L_x: \frac{\partial \Phi}{\partial x} = 0; \tag{2}$$
$$z = 0: \Phi = 0; \quad z = L_z: \frac{\partial \Phi}{\partial z} = 0.$$

Здесь функция $\Phi(x,z,t)$ описывает концентрацию примеси, $S_\Phi(x,z,t)$ – распределение и интенсивность источника, $\vec{V} = (u,w)$ – вектор скорости, Γ – коэффициент диффузии, Q – мощность источника, x_0, z_0, t_0 – координаты источника и момент выброса примеси.

Существование и единственность решения поставленной задачи доказаны в [1].

Генерация неструктурированных, в частности треугольных, сеток сегодня требует существенно меньше времени вычислителя, сравнимого со временем построения структурированных или блочно-структурированных сеток, а современные производительные вычислительные системы позволяют генерировать неструктурированные сетки большого объема. Такие сетки можно сгущать в подобластях с большими градиентами решения, не перестраивая на всей области.

Для решения поставленной задачи с помощью сеточного генератора Gambit на области поиска решения строится триангуляция, не содержащая тупоугольных треугольников.

Дискретный аналог задачи (1)–(2) построим методом конечного объема, позволяющим гарантировать выполнение законов сохранения для каждой ячейки сетки и, соответственно, для всей области.

В качестве конечного объема выберем ячейку Дирихле (рис.1): для каждого узла сетки строится контур из отрезков, соединяющих точки пересечения срединных перпендикуляров треугольников $C_1 \ldots C_k$. Таким образом, ячейка Дирихле представляет собой

множество точек области, более близких к данному узлу, чем к любому другому.

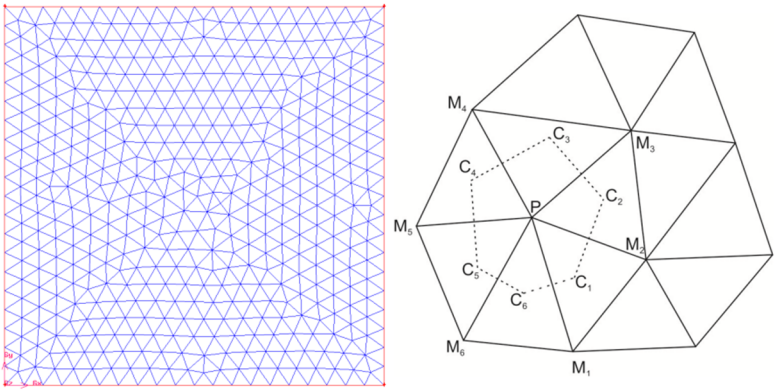


Рис.1. Расчетная сетка на области и изображение контрольного объема

Неизвестные значения концентрации предполагается определять в узлах сетки, а потоки через грани конечного объема аппроксимировать через эти значения. Компоненты скорости u, w заданы в точке пересечения отрезков, соединяющих центры описанных окружностей смежных треугольников C_k, C_{k-1} и их общей стороны PM_k.

Для определения значений неизвестных концентраций в узлах триангуляции M_i исходное уравнение интегрируется по соответствующей ячейке:

$$\int_{D_i}\left[\frac{\partial\Phi}{\partial t}+div\bar{\mathrm{I}}-S_\Phi\right]ds=0.$$

Воспользовавшись формулой Грина и теоремой о среднем, перейдем от интеграла по площади к интегралу по ограничивающему ее контуру и получим соотношение

$$\frac{d}{dt}\overline{\Phi}S_i+\int_{\partial D_i}\left[(\overline{V}\Phi)_n-\Gamma\frac{\partial\Phi}{\partial n}\right]dl-S_\Phi S_i=0.$$

Здесь S_i – площадь конечного объема.

Аппроксимируя полученные значения с помощью приближенных формул, получим дискретный аналог уравнения (1):

$$\frac{\tilde{\Phi}_P - \Phi_P}{\Delta t} S_P + \sum_{k=1}^{N_P} V_n \Phi_n \left|C_k C_{k-1}\right| - \Gamma \sum_{k=1}^{N_P} \frac{\Phi_{M_k} - \Phi_P}{\left|PM_k\right|} \left|C_k C_{k-1}\right| = S_\Phi S_P,$$

P – текущий узел триангуляции, N_P – число треугольников, содержащих общую вершину P, S_P – площадь ячейки Дирихле для P.

Для аппроксимации конвективного слагаемого здесь применяется схема с разностями против потока: значение на грани конечного объема рассчитывается в зависимости от направления потока через эту грань:

$$V_n \Phi_n = \begin{cases} V_n \Phi_P, \; V_n \geq 0, \\ V_n \Phi_{M_k}, \; V_n < 0. \end{cases}$$

$$V_n \Phi_n \left|C_k C_{k-1}\right| = \left[\max\left(un_x + wn_z, 0\right) \Phi_P - \max\left(-un_x - wn_z, 0\right) \Phi_{M_k} \right] \left|C_k C_{k-1}\right|.$$

$$n_x = \frac{x_{M_k} - x_P}{\left|PM_k\right|}, n_z = \frac{y_{M_k} - y_P}{\left|PM_k\right|}.$$

В итоге вычислительная формула для значения концентрации в текущем узле P на временном слое n+1 будет иметь вид (3):

$$\tilde{\Phi}_P = \Phi_P \left(1 - \frac{\Delta t}{S_P} \sum_{k=1}^{N_P} \left[\max\left(un_x + wn_z, 0\right) \left|C_k C_{k-1}\right| + \Gamma \frac{\left|C_k C_{k-1}\right|}{\left|PM_k\right|} \right] + \right.$$
$$\left. \frac{\Delta t}{S_P} \sum_{k=1}^{N_P} \Phi_{M_k} \left[\max\left(-un_x - wn_z, 0\right) \left|C_k C_{k-1}\right| + \Gamma \frac{\left|C_k C_{k-1}\right|}{\left|PM_k\right|} \right] \right) + S_\Phi. \qquad (4)$$

Замечание. В случае, когда текущая вершина P лежит на границе расчетной области, ячейку предлагается замыкать через отрезки, соединяющие узел P с серединами граничных ребер C_1^*, C_5^* (рис. 2).

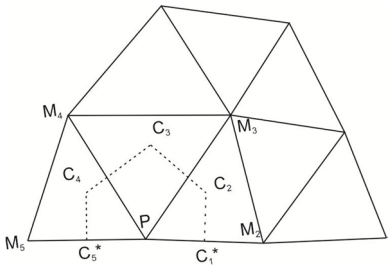


Рис. 2

Таким образом, получена явная по времени консервативная разностная схема первого порядка аппроксимации.

Использование явных схем является предпочтительным для проведения расчета на областях большой площади, когда количество узлов сетки велико и становится оправданным распараллеливание алгоритма решения. Однако при использовании явных схем следует учитывать ограничения, накладываемые условием устойчивости на шаг по времени. Для данного случая достаточное условие сходимости метода получается из условия наличия диагонального преобладания у матрицы полученной системы линейных алгебраических уравнений и записывается в виде $\Delta t \le \min_i \frac{S_i}{\sum_{k=0}^{N_i} a_{ik}}$. Здесь N_i – число треугольных элементов, образующих ячейку Дирихле, S_i – площадь ячейки Дирихле для текущего узла, a_{ik} – элемент матрицы системы (4).

Тестирование построенного численного метода проводилось с помощью задачи о мгновенном точечном источнике, аналитическое решение которой имеет вид

$$\Phi(x,y,t) = \frac{Q}{4\pi\Gamma(t-t_0)} \exp\left(-\frac{(x-x_0-u(t-t_0))^2}{4\Gamma(t-t_0)}\right) \exp\left(-\frac{(z-z_0-w(t-t_0))^2}{4\Gamma(t-t_0)}\right).$$

Численное решение поставленной задачи находилось для случая

$u = 3\,м/с;\ w = 0,5\ м/с; \Gamma = 0,5 м^2/\text{с};\ \ \text{Q} = 1кг;$

$x_0 = 100\,м;\ z_0 = 90м;\ t_0 = 10\,с; L_x = L_x = 180$

на треугольной сетке, содержащей 489 элементов, и представлено на рис. 3.

Из рис. 3 видно, что с течением времени примесь переносится в направлении сносящего потока, задаваемого полем скорости, а также распространяется с уменьшением концентрации за счет диффузии. Таким образом, полученное численное решение соответствует физике изучаемого процесса и, как видно из рисунка, хорошо согласуется с аналитическим.

Для выявления зависимости качества получаемого решения от выбора сетки проведем расчет по противопотоковой схеме, построенной для структурированной сетки $22 \times 22 = 484$ узла.

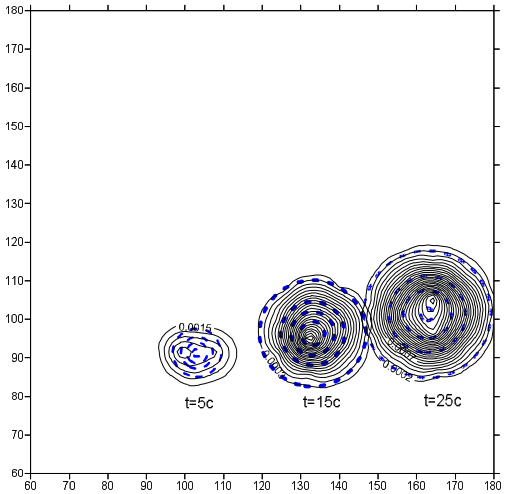


Рис. 3. Численное решение в указанные моменты времени. (Штриховой линией обозначено точное решение)

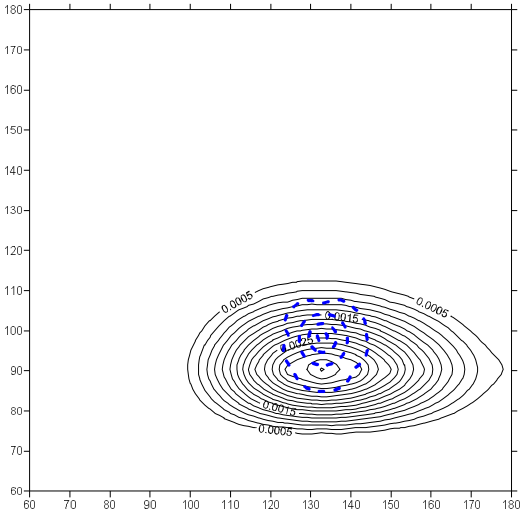


Рис. 4. Численное решение задачи на структурированной сетке при $t = 15\text{с}$. (Штриховой линией обозначено точное решение)

Результат тестового расчета для момента времени $t = 15\,\text{с}$ приведен на рис. 4.

Видно, что полученное численное решение значительно отличается от аналитического. Достижение более точного решения на структурированной сетке требует большего количества ее узлов.

В результате можно отметить: с помощью метода конечного объема на неструктурированной сетке построена явная разностная схема первого порядка. Полученный численный метод протестирован с помощью задачи о мгновенном точечном источнике в двумерной прямоугольной области. Сравнение с расчетом на структурированной сетке показывает, что треугольная сетка позволяет получить более точное решение при приблизительно равном числе узлов. Дальнейшие исследования в данном направлении предполагают проведение расчетов для областей сложной геометрии, задание переменного поля скоростей и построение схем более высокого порядка.

Литература

1. *Марчук Г.И.* Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982. 320 с.