5. Приказ от 13.02.2016 г. N 552 «Об утверждении нормативов качества воды водных объектов рыбохозяйственного значения, в том числе нормативов предельно допустимых концентраций вредных веществ в водах водных объектов рыбохозяйственного значения» (с изменениями на 10 марта 2020 года)
6. Новостной сайт www.NDTV.com

МЕТОД КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЕЙ ДЛЯ РАСЧЕТА ДИФФУЗИИ МАССОВОЙ КОНЦЕНТРАЦИИ (НАПРИМЕР, ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД КРЭНКА-НИКОЛСОНА)

Ян Хэн

Научный руководитель профессор Савичев О.Г.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

Проблема диффузии загрязняющих веществ по существу является проблемой диффузии концентрации вещества. Различные методы расчета диффузии концентрации вещества имеют разную сферу применения[1].

Метод конечных разностей

Предполагая, например, что f является функцией независимой переменной x, ее частная производная в точке x_0 равна

$$\frac{\partial f}{\partial x}=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{f(x_0+\Delta x)-f(x_0)}{\Delta x}$$

Если функция f определена в точке x0, то в точке x0+Δx, ее можно аппроксимировать рядом Тейлора следующим образом:

$$f(x_0+\Delta x)=f(x_0)+\sum_{1}^{n}\frac{\Delta x^n\partial^n f}{n!\,\partial x^n}=f(x_0)+\Delta x\frac{\partial f}{\partial x}+\Delta x^2\frac{\partial^2 f}{2\partial x^2}+\cdots\cdots$$

Сохраняя только первый член правой части, последнее уравнение дает

$$\frac{\partial f}{\partial x}=\frac{f(x_0+\Delta x)-f(x_0)}{\Delta x}$$

Основные понятия численного подхода

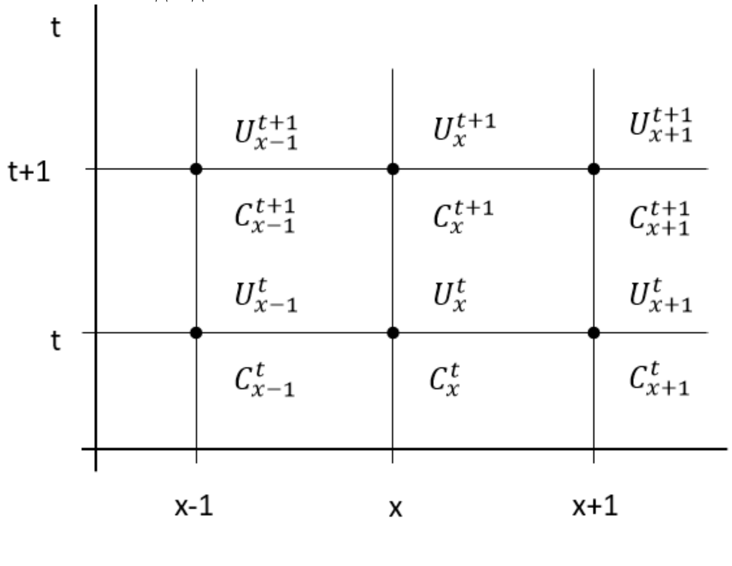

Рис.1. Сетка x,t для численной интерпретации

$$\frac{\partial CU}{\partial x}\to\frac{1}{\Delta x}\left[\frac{C_{x+1}^{t}U_{x+1}^{t}+C_{x+1}^{t+1}U_{x+1}^{t+1}}{2}-\frac{C_{x}^{t}U_{x}^{t}+C_{x}^{t+1}U_{x}^{t+1}}{2}\right]$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\to\frac{E}{2\Delta x^2}\left[C_{x+1}^{t}+C_{x+1}^{t+1}-2(C_{x}^{t}+C_{x}^{t+1})+C_{x-1}^{t}+C_{x-1}^{t+1}\right]$$

$$\frac{\partial C}{\partial t}=E\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}-U\frac{\partial C}{\partial x}-kC$$

$$\omega_1 C_x^t+\omega_2 C_{x+1}^t+\omega_3 C_x^{t+1}+\omega_4 C_{x+1}^{t+1}+\omega_5=0$$

$$\omega_1=\left[\frac{1}{2\Delta t}+\frac{U_x^t}{2\Delta x}-\frac{E}{\Delta x^2}-\frac{k}{4}\right]\qquad \omega_2=\left[\frac{1}{2\Delta t}-\frac{U_{x+1}^t}{2\Delta x}+\frac{E}{\Delta x^2}-\frac{k}{4}\right]$$

$$\omega_3=\left[-\frac{1}{2\Delta t}+\frac{U_x^{t+1}}{2\Delta x}-\frac{E}{\Delta x^2}-\frac{k}{4}\right]\quad \omega_4=\left[-\frac{1}{2\Delta t}-\frac{U_{x+1}^{t+1}}{2\Delta x}-\frac{E}{\Delta x^2}-\frac{k}{4}\right]\quad \omega_5=\left[\frac{E}{2\Delta x^2}(C_{x-1}^t-C_{x-1}^{t+1})\right]$$

Численная схема Крэнка-Николсона

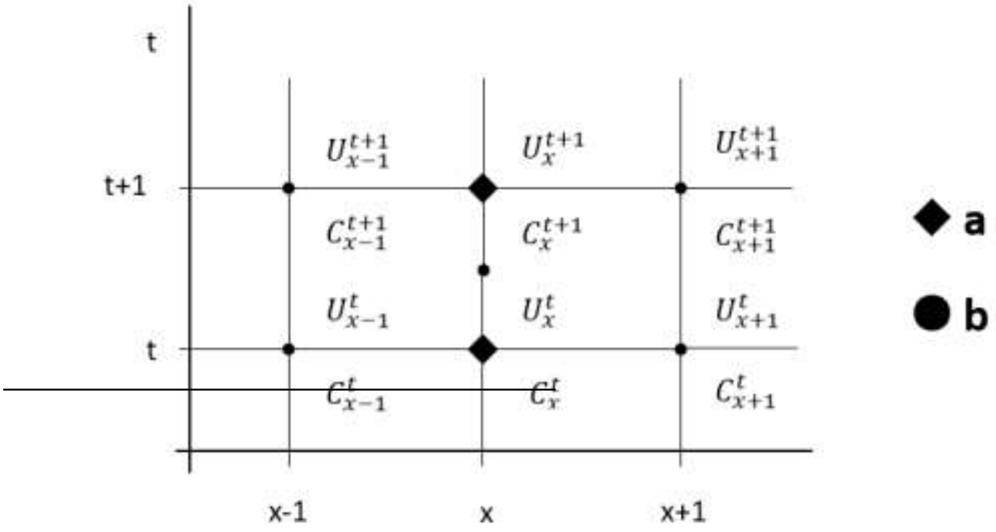

Рис.2. Упрощенная сетка схемы Кранка-Николсона: точки a содержат производную по времени и вторую производную по пространству, а точки b содержат как первую, так и вторую производную по пространству

В случае стационарного равномерного течения в потоке

$$U_{\boldsymbol{x}}^{\boldsymbol{t}} = U = \text{Постоянный}$$

Производная скорости по времени и пространству равна нулю

$$\frac{\partial \mathrm{U}}{\partial t} = 0 \quad \frac{\partial \mathrm{U}}{\partial x} = 0$$

И фундаментальное уравнение переноса в одномерной (1D) форме принимает вид

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial UC}{\partial x} = E\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - kC \rightarrow \frac{\partial C}{\partial t} + C\frac{\partial U}{\partial x} + U\frac{\partial C}{\partial x} = E\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - kC \rightarrow \frac{\partial C}{\partial t} + U\frac{\partial C}{\partial x} = E\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - kC$$

Чтобы преобразовать приведенное выше дифференциальное уравнение в дискретное выражение, производная по времени становится

$$\frac{\partial C}{\partial t} \rightarrow \frac{C_x^{t+1} - C_x^t}{\Delta t} \quad \frac{\partial C}{\partial x} \rightarrow \frac{\frac{C_{x+1}^{t+1} - C_{x-1}^{t+1}}{2\Delta x} + \frac{C_{x+1}^{t} - C_{x-1}^{t}}{2\Delta x}}{2} \quad \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \rightarrow \frac{\frac{C_{x+1}^{t} - 2C_x^t + C_{x-1}^{t}}{\Delta x^2} + \frac{C_{x+1}^{t+1} - 2C_x^{t+1} + C_{x-1}^{t+1}}{\Delta x^2}}{2}$$

Следовательно, основное дифференциальное уравнение заменяется на

$$\frac{C_x^t - C_x^{t+1}}{\Delta t} - \frac{U}{4\Delta x}\left(C_{x+1}^{t+1} - C_{x-1}^{t+1} + C_{x+1}^{t} - C_{x-1}^{t}\right) + \frac{E}{2\Delta x^2}\left[C_{x+1}^{t} + C_{x-1}^{t+1} - 2\left(C_x^t + C_x^{t+1}\right) + C_{x-1}^{t} + C_{x-1}^{t+1}\right] - \frac{k}{2}\left(C_x^t + C_x^{t+1}\right) = 0$$

Обсуждение метода конечных разностей

Очевидно, что метод конечных разностей требует сетки постоянного и одинакового размера во всей расчетной области. Его главный недостаток — необходимость прямоугольного вычислительного поля, это может увеличить количество шагов и потребовать больше вычислительного времени. Тем не менее, метод конечных разностей является самым простым численным методом разработки алгоритмов, особенно в одномерных моделях.

Литература

1. Nuttawee Pengpom, Somsak Vongpradubchai, Phadungsak Rattanadecho. Numerical Analysis of Pollutant Concentration Dispersion and Convective Flow in a Two-dimensional Confluent River Model[J]. Mathematical Modelling of Engineering Problems,2019,6(2).