# ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ РЕШЕНИЯ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЯХ

Семенчин Е. А.
Кубанский государственный университет, г. Краснодар
Стефанова Н. Г.
Ставропольский государственный университет, г. Ставрополь

Рассмотрим численное решение полуэмпирического уравнения турбулентной диффузии:

$$\frac{\partial q}{\partial t}+u\frac{\partial q}{\partial x}-w\frac{\partial q}{\partial z}=\frac{\partial}{\partial x}K_x\frac{\partial q}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial y}K_y\frac{\partial q}{\partial y}+\frac{\partial}{\partial z}K_z\frac{\partial q}{\partial z}+f\ , \tag{1}$$

Для уравнения (1) должны быть заданы начальное условие

$$q(t_0,x,y,z)=j\,(x,y,z) \tag{2}$$

и граничные условия:

$$\frac{\partial q}{\partial z}=0 \text{ при } z=0, \tag{3}$$

если примесь полностью отражается подстилающей поверхностью;

$$q(t,x,y,z)=0 \text{ при } z=0 \tag{4}$$

если примесь полностью поглощается подстилающей поверхностью
и

$$q(t,x,y,z)\to 0,\ x^2+y^2+z^2\to\infty,\ z\ge z_0 \tag{5}$$

Преобразуем полуэмпирическое уравнение (1) к следующему виду:

$$\frac{\partial q}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}[a_x q]+\frac{\partial}{\partial y}[a_y q]+\frac{\partial}{\partial z}[a_z q]=\frac{\partial^2(K_x q)}{\partial x^2}+\frac{\partial^2(K_y q)}{\partial y^2}+\frac{\partial^2(K_z q)}{\partial z^2}+f\ , \tag{6}$$

$$a_x=u+\frac{\partial K_x}{\partial x},\quad a_y=\frac{\partial K_y}{\partial y},\quad a_z=-w+\frac{\partial K_z}{\partial z} \tag{7}$$

Краевая задача (1) – (4) описывает два принципиально различных физических процесса, один из которых является процессом переноса субстанции с ее сохранением вдоль траектории под действием ветра и силы тяжести, и описывается задачей:

1) $$\frac{\partial q_1}{\partial t}=-\frac{\partial}{\partial x}[a_x q_1]-\frac{\partial}{\partial y}[a_y q_1]-\frac{\partial}{\partial z}[a_z q_1]\ , \tag{8}$$

$$q_1(t_j,x,y,z)=\begin{cases} j\,(x,y,z),\ j=0; \\ q_2(t_j,x,y,z),\ j=1,2,....,\end{cases} \tag{9}$$

$$q_1(t,x,y,z)\to 0,\ x^2+y^2+z^2\to\infty,\ z\ge z_0 \tag{10}$$

Второй физический процесс связан с диффузией примеси в процессе распространения и описывается задачей:

2) $$\frac{\partial q_2}{\partial t}=\frac{\partial^2(K_x q_2)}{\partial x^2}+\frac{\partial^2(K_y q_2)}{\partial y^2}+\frac{\partial^2(K_z q_2)}{\partial z^2}+f\ , \tag{11}$$

$$q_2(t_j,x,y,z)=q_1(t_{j+1},x,y,z), \tag{12}$$

$$\frac{\partial q_2}{\partial z}=0 \text{ при } z=0, \tag{13}$$

$$q_2(t,x,y,z)\to 0,\ x^2+y^2+z^2\to\infty,\ z\ge z_0 \tag{14}$$

С помощью методов теории расщепления [2] задача (8) - (10) переноса примеси редуцируется в свою очередь на каждом интервале разбиения $[t_i, t_{i+1}]$, $i$ = 0,1,..., временного интервала $[t_0, T]$, (причем временной интервал выбирается достаточно малым, чтобы свести до минимума возможную погрешность расщепления), к последовательному решению следующих задач:

1.1) перенос примеси вдоль оси OX:

$$\frac{\partial q_{11}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\left[a_x q_{11}\right], \tag{15}$$

$$q_{11}(t, x, y, z) = q_1(t_0, x, y, z), \qquad t \in [t_i, t_{i+1}] \tag{16}$$

$$q_{11}(t, x, y, z) \to 0,\ x^2 + y^2 + z^2 \to \infty,\ z \ge z_0 \tag{17}$$

1.2) перенос примеси вдоль оси OY:

$$\frac{\partial q_{12}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial y}\left[a_y q_{12}\right], \tag{18}$$

$$q_{12}(t, x, y, z) = q_{11}(t + \Delta t, x, y, z), \qquad t \in [t_i, t_{i+1}] \tag{19}$$

$$q_{12}(t, x, y, z) \to 0,\ x^2 + y^2 + z^2 \to \infty,\ z \ge z_0 \tag{20}$$

1.3.) перенос примеси вдоль оси OZ:

$$\frac{\partial q_{13}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z}\left[a_z q_{13}\right], \tag{21}$$

$$q_{13}(t, x, y, z) = q_{12}(t + \Delta t, x, y, z), \qquad t \in [t_i, t_{i+1}] \tag{22}$$

$$q_{13}(t, x, y, z) \to 0,\ x^2 + y^2 + z^2 \to \infty,\ z \ge z_0, \tag{23}$$

где $\Delta t$ - шаг дискретизации по времени.

Задача диффузии примеси (11) - (14) расщепляется на три последовательно решаемых задачи [2]:

2.1.) диффузия примеси вдоль оси OX:

$$\frac{\partial q_{21}}{\partial t} = \frac{\partial^2\left(K_x q_{21}\right)}{\partial x^2}, \tag{24}$$

$$q_{21}(t, x, y, z) = q_{12}(t, x, y, z), \tag{25}$$

$$\frac{\partial q_{21}}{\partial z} = 0 \text{ при } z=0, \tag{26}$$

$$q_{21}(t, x, y, z) \to 0,\ x^2 + y^2 + z^2 \to \infty,\ z \ge z_0 \tag{27}$$

2.2.) диффузия примеси вдоль оси OY:

$$\frac{\partial q_{22}}{\partial t} = \frac{\partial^2\left(K_y q_{22}\right)}{\partial y^2}, \tag{28}$$

$$q_{22}(t, x, y, z) = q_{21}(t + \Delta t, x, y, z), \tag{29}$$

$$\frac{\partial q_{22}}{\partial z} = 0 \text{ при } z=0, \tag{30}$$

$$q_{22}(t, x, y, z) \to 0,\ x^2 + y^2 + z^2 \to \infty,\ z \ge z_0 \tag{31}$$

2.3.) диффузия примеси вдоль оси OZ:

$$\frac{\partial q_{23}}{\partial t} = \frac{\partial^2\left(K_z q_{23}\right)}{\partial z^2}, \tag{32}$$

$$q_{23}(t, x, y, z) = q_{22}(t + \Delta t, x, y, z), \tag{33}$$

$$\frac{\partial q_{23}}{\partial z} = 0 \text{ при } z=0, \tag{34}$$

$$q_{23}(t, x, y, z) \to 0,\ x^2 + y^2 + z^2 \to \infty,\ z \ge z_0 \tag{35}$$

Решение краевых задач (15) – (35) осуществляется путем аппроксимации по формулам численного дифференцирования. Получающиеся при этом системы разностных уравнений решаются методом прогонки.

Рассмотрим численное решение первой задачи (15) – (17).

Запишем явную разностную схему:

$$\frac{\partial q_{11}}{\partial t} = -\frac{\partial (a_x q_{11})}{\partial x}, \tag{36}$$

$$\frac{q_{11i}^{t+1} - q_{11}{}^{t}{}_{i}}{\Delta t} = -\frac{(a_x q_{11})_{i+1}{}^{t} - (a_x q_{11})^{t}{}_{i-1}}{2\Delta x} \tag{37}$$

Теперь запишем неявную разностную схему:

$$\frac{q_{11i}^{t+1} - q_{11i}^{t}}{\Delta t} = -\frac{(a_x q_{11})_{i+1}^{t+1} - (a_x q_{11})_{i-1}^{t+1}}{2\Delta x} \tag{38}$$

Находя полусумму явной и неявной схем, получим схему Кранка-Николсона

$$\frac{q_{11i}^{t+1} - q_{11i}^{t}}{\Delta t} = -\frac{1}{4\Delta x}((a_x q_{11})_{i+1}^{t} - (a_x q_{11})_{i-1}^{t} + (a_x q_{11})_{i+1}^{t+1} - (a_x q_{11})_{i-1}^{t+1}) \tag{39}$$

преобразуем (39):

$$-\frac{\Delta t (a_x)_{i-1}^{t+1}}{4\Delta x}(q_{i-1}^{t+1}) + q_i^{t+1} + \frac{\Delta t (a_x)_{i+1}^{t+1}}{4\Delta x}(q_{i+1}^{t+1}) = -\frac{\Delta t (a_x)_{i-1}^{t+1}}{4\Delta x} q_{i-1}^{t+1} \tag{40}$$

Для решения системы (40) эффективен метод прогонки, суть которого в следующем:

Пусть $A_i = -\frac{\Delta t (a_x)_{i-1}^{t+1}}{4\Delta x}$ , $C_i = 1$, $B_i = \frac{\Delta t (a_x)_{i+1}^{t+1}}{4\Delta x}$, $r_i = q_i^t - \frac{1}{4\Delta x}((a_x q)_{i+1}^{t} - (a_x q)_{i-1}^{t})$, тогда (40) запишем в виде :

$$A_i q_{i-1} + C_i q_i + B_i q_{i+1} = r_i, \quad (i=0,1,2,\ldots m) \tag{41}$$

Проведем линейную интерполяцию $q_i$:

$$q_i = k_{i+1} q_{i+1} + b_{i+1}, \quad (i = 0,1,2,\ldots m-1) \tag{42}$$

$$q_{i-1} = k_i q_i + b_i = k_i (k_{i+1} q_{i+1} + b_{i+1}) + b_i = k_i k_{i+1} q_{i+1} + k_i b_{i+1} + b_i \tag{43}$$

подставляя (42) и (43) в (41) получим:

$$A_i k_i k_{i+1} q_{i+1} + A_i k_i b_{i+1} + A_i b_i + C_i k_{i+1} q_{i+1} + C_i b_{i+1} + B_i q_{i+1} = r_i$$

разделим (44):

$$\begin{cases} A_i k_i k_{i+1} + C_i k_{i+1} + B_i = 0 \\ A_i k_i b_{i+1} + A_i b_i + C_i b_{i+1} - r_i = 0, \end{cases} \tag{44}$$

где $q_{i+1} \neq 0$.

Отсюда находим $k_{i+1}, b_{i+1}$:

$$k_{i+1} = -\frac{B_i}{A_i k_i + C_i}, \qquad b_{i+1} = \frac{r_i - A_i b_i}{A_i k_i + C_i} \tag{45}$$

Примем $\kappa_0 = 0$ *и* $b_0 = 0$. Рассчитаем все значения $k_i, b_i$. Теперь можно выполнить обратную прогонку: по значениям $k_{i+1}, b_{i+1}$ вычислим все значения $q_i$, положив $q_m = 0$.

Аналогично можно найти решение остальных задач (18) – (35), определяющих распространение примеси вдоль осей OX и OZ, учитывая, что для уравнений второго порядка коэффициенты $A_i, C_i, B_i, r_i$ будут иметь вид:

$$A_i = -\frac{\Delta t (k_x)_{i-1}^{t+1}}{2(\Delta x)^2}, \quad C_i = \frac{\Delta t (k_x)_{i}^{t+1}}{(\Delta x)^2}, \quad B_i = -\frac{\Delta t (k_x)_{i+1}^{t+1}}{2(\Delta x)^2}$$

$$r_i = q_i^t + \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2}(k_x q)_{i+1}^t - \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}(k_x q)_i^t) + \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2}(k_x q)_{i-1}^t,$$

Тогда приращение решения исходного уравнения (6) запишется как сумма приращений решений каждого из уравнений (15) – (35).

Данная задача сводится к выяснению вопроса о необходимости задания граничных условий для тех или иных случаев.

Таблица 1

Зависимость концентрации примеси от времени

| без усл. 1 сек. | отражение 1 сек. | поглощение 1 сек. | без усл. 6 сек. | отражение 6 сек. | поглощение 6 сек. | без усл. 12 сек. | без услов. 46 сек. | отражение 46 сек. | поглощение 46 сек. |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1,31 | 1,31 | 1,31 | 1,79 | 1,79 | 1,79 | 0,62 | 3,62E-05 | 3,39E-05 | 1,29E-05 |
| 2,63 | 2,63 | 2,63 | 3,59 | 3,59 | 3,59 | 1,24 | 7,24E-05 | 6,77E-05 | 2,16E-05 |
| 3,93 | 3,93 | 3,93 | 5,39 | 5,39 | 5,39 | 1,86 | 0,0001 | 0,0001 | 3,89E-05 |
| 5,25 | 5,25 | 5,25 | 7,19 | 7,19 | 7,19 | 2,48 | 0,00014 | 0,00013 | 5,19E-05 |
| 6,56 | 6,56 | 6,56 | 8,99 | 8,99 | 8,99 | 3,09 | 0,00018 | 0,00016 | 6,49E-05 |
| 7,88 | 7,88 | 7,88 | 10,78 | 10,78 | 10,78 | 3,72 | 0,00021 | 0,00017 | 7,79E-05 |
| 9,19 | 9,19 | 9,19 | 12,58 | 12,58 | 12,58 | 4,34 | 0,00025 | 0,00024 | 9,09E-05 |
| 10,5 | 10,5 | 10,5 | 14,38 | 14,38 | 14,38 | 4,96 | 0,0003 | 0,00027 | 0,0001 |
| 11,81 | 11,81 | 11,81 | 16,18 | 16,18 | 16,18 | 5,57 | 0,00032 | 0,0003 | 0,00012 |
| 13,13 | 13,13 | 13,13 | 17,97 | 17,97 | 17,97 | 6,19 | 0,00036 | 0,00034 | 0,00013 |
| 14,44 | 14,44 | 14,44 | 19,77 | 19,77 | 19,77 | 6,81 | 0,0004 | 0,00037 | 0,00014 |

Проанализируем приведенные в таблице 1 расчеты.

Пусть граничные условия не учитываются (рассматривается задача Коши (1) - (2)).

В течение времени 1с.–12с., с момента действия источника, наблюдается возрастание концентрации с 1,31 кг/м$^3$ до 1,79 кг/м$^3$ ( см. строку № 2 таблицы 1); в течение 12с. – 46с. - уменьшение с 0,62 кг/м$^3$ – 3,62E- 05 кг/м$^3$ .

Аналогичные результаты изменения концентрации до 46с. имеем также в случае, когда граничные условия (3), (4) в задаче (1) – (4) учитываются.

После 46с., с момента действия источника, наблюдается значительное расхождение значений концентрации q для задач (1) - (2) и (1) – (4). Без учета граничных условий: с 3,62E- 05 кг/м$^3$ до 0 кг/м$^3$ ,с учетом этих же условий: а) поглощение с 1,29E- 05 кг/м$^3$ до 0 кг/м$^3$, б) отражение с 3,39E- 05 кг/м$^3$ до 0 кг/м$^3$.

Программная реализация вышеописанного численного решения полуэмпирического уравнения турбулентной диффузии позволяет сделать вывод, что значения концентраций рассеяния примеси, полученные в результате расчетов в момент выброса ее в атмосферу, при задании граничных условий и без учета их имеют существенные различия.

## Литература


1. Марчук Г. И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. – М.: Наука, 1982. – 320 с.
2. Марчук Г. И. Методы расщепления. – М.: Наука, 1988. – 264 с.