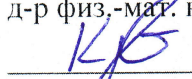


Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)
Механико-математический факультет

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ В ГЭК

Руководитель ООП

д-р физ.-мат. наук, профессор

 П.А. Крылов

подпись
« 17 » июня 2022 г.

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА МАГИСТРА
(МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ)

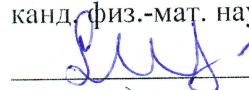
ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ПРЯМОЙ ЗАДАЧИ ПЕРЕНОСА ПРИМЕСИ

по направлению подготовки 01.04.01 – Математика
направленность (профиль) «Фундаментальная математика»

Каратаева Екатерина Алексеевна

Руководитель ВКР

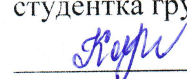
канд. физ.-мат. наук, доцент

 Е.А. Шельмина

подпись
« 17 » июня 2022 г.

Автор работы

студентка группы № 042011

 Е.А. Каратаева

подпись
« 17 » июня 2022 г.

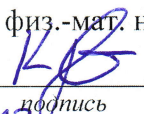
Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)
Механико-математический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Руководитель ООП

д-р физ.-мат. наук, профессор

 П.А. Крылов

«17» ^{подпись} июня 2021 г.

ЗАДАНИЕ

по выполнению выпускной квалификационной работы магистра обучающейся

Каратаевой Екатерине Алексеевне

Фамилия Имя Отчество обучающегося

по направлению подготовки 01.04.01 – Математика, направленность (профиль)

«Фундаментальная математика»

1 Тема выпускной квалификационной работы

Численное решение прямой задачи переноса примеси

2 Срок сдачи обучающимся выполненной выпускной квалификационной работы:

а) в учебный офис / деканат – июнь 2022 г. б) в ГЭК – июнь 2022 г.

3 Исходные данные к работе:

Объект исследования – Подход Эйлера и Лагранжа распространения примеси.

Предмет исследования – Трехмерная задача распространения примеси.

Цель исследования – Численное решение трехмерной задачи переноса примеси
подходом Эйлера и Лагранжа, сравнение полученных
результатов с точным решением.

Задачи:

Построить разностные схемы для решения задачи для каждого из подходов, численно
решить задачи с помощью любого языка программирования, найти точное решение,
провести сравнительный анализ полученных решений.

Методы исследования:

Методы вычислительной математики.

Организация или отрасль, по тематике которой выполняется работа, –

Национальный исследовательский Томский государственный университет

4 Краткое содержание работы

Изучение литературы по теме распространения примесей в атмосфере и решения задач.

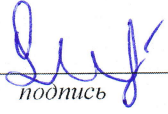
Выведение формул для численного решения, написание расчетных программ.

Сравнительный анализ полученного точного и численного решения

Руководитель выпускной квалификационной работы

доцент ММФ ТГУ

должность, место работы

 / Е. А. Шельмина
подпись *И.О. Фамилия*

Задание принял к исполнению

студентка ММФ ТГУ

должность, место работы

 / Е. А. Каратаева
подпись *И.О. Фамилия*

АННОТАЦИЯ

Дипломная работа содержит: 59 страниц, 24 иллюстраций, 27

использованных источников и литературы.

Ключевые слова: задача переноса примеси, подход Эйлера, подход Лагранжа, численное решение.

Объекты исследования: подход Эйлера и Лагранжа распространения примеси, численные методы.

Цель работы: численное решение трехмерной задачи переноса примеси подходом Эйлера и Лагранжа, сравнение полученных результатов с точным решением

Полученные результаты:

Рассмотрен подход Эйлера моделирования распространения примеси. Численно решено уравнение переноса, учитывающее ветер, диффузию и интенсивность источника. Проведен сравнительный анализ численного решения и точного, показавший, что результаты численного решения достаточно близки к результатам точного. Представлены сравнительные графики.

Рассмотрен подход Лагранжа моделирования распространения примеси, приведены расчетные формулы. Численно решено уравнение траектории для каждой частицы, получена концентрация в заданном объеме воздуха.

Проведен сравнительный анализ полученного численного решения и точного.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	4
1 Основные понятия.....	7
1.1 Атмосфера	7
1.2 Математическое моделирование.....	9
1.3 Физика процессов. Уравнение переноса	10
1.4 Физика процессов. Турбулентность	12
2 Эйлеров подход распространения примеси	15
2.1 Постановка задачи	15
Физическая.....	15
Математическая.....	15
2.2 Численные схемы решения задачи	18
Аппроксимация нестационарного члена уравнения.....	19
Аппроксимация адвективных членов уравнения.....	20
Аппроксимация диффузионных слагаемых	24
Аппроксимация источникового члена	26
Полученная разностная схема.....	26
2.3 Порядок аппроксимации численной схемы и схемная вязкость	29
2.4 Устойчивость численной схемы	31
2.5 Сходимость численного решения	33
2.6 Точное решение	34
2.7 Программная реализация решения	35
3 Лагранжев подход распространения примеси	42
3.1 Постановка задачи	46
Физическая.....	46
Математическая.....	46
3.2 Численная схема решения задачи	47
3.3 Точное решение	48
3.4 Программная реализация решения	50

ЗАКЛЮЧЕНИЕ	55
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ И ИСТОЧНИКОВ	57

ВВЕДЕНИЕ

Деятельность промышленных предприятий ведет к загрязнению окружающей среды, в частности, к ухудшению качества атмосферного воздуха вследствие выбросов загрязняющих веществ в атмосферу. Промышленные выбросы имеют большое негативное влияние на экологию. От них страдает население, животный и растительный мир. Они также являются причиной изменения климата планеты. Важно изучение закономерностей распространения примесей и создание моделей по прогнозированию загрязнений.

Согласно информации Федеральной службы государственной статистики, выбросы загрязняющих атмосферу веществ уменьшаются с каждым годом [1], составив около 32 млн тонн в 2018 году, 22,7 млн тонн в 2019 и 22,2 млн тонн в 2020. При этом выбросы от стационарных источников остаются на одном уровне год за годом – около 17 млн тонн ежегодно (по информации за 2018-2020 годы). Уменьшение достигается за счет передвижных источников, этому способствует распространение электрических двигателей, а в сфере промышленных предприятий не приходят технологии, способные существенно повлиять на экологическую ситуацию, поэтому картина выбросов в этой сфере не меняется.

Актуальность работы происходит из неиссякаемой потребности изучения загрязнения воздуха: выбросы от стационарных источников не уменьшаются, и в данный момент не наблюдается никакой положительной динамики по улучшению ситуации с ними. Изучать их нужно постоянно, исследование характеристик атмосферы, поведения воздушных масс при различных параметрах и загрязнения воздуха важно для человечества, так как проблема загазованности наблюдается со времен начала бурного развития промышленности. Экология, а вместе с ней и жизнь и здоровье всего человечества зависит от качества воздуха.

Распространение выбросов в атмосфере происходит за счет их переноса воздушными массами и диффузии вследствие пульсаций воздуха. Дымовой факел заводской трубы расширяется по мере удаления от источника, наполняя атмосферу на своём пути вредными примесями.

Задача, когда по параметрам источника нужно определить направление дыма и концентрацию загрязняющих веществ, называется прямой задачей распространения примеси. Именно ей посвящена данная работа.

Условно подходы к решению задачи можно разделить на два: эйлеров и лагранжев.

Для подхода Эйлера характерно уделение внимания области исследования, таким её параметрам, как скорость ветра, температура, коэффициенты диффузии и иные характеристики, влияющие на распространение примеси. Частицы примеси являются единым облаком, распространяющимся по пространству. Решается уравнение адвекции-диффузии, получается концентрация примеси в области.

При подходе Лагранжа прослеживается жизненный цикл каждой отдельной частицы. Он начинается в момент попадания в область и заканчивается в момент покидания частицей области исследования. Характеристики среды также имеют значение, они влияют на характер движения частицы, определяя её траекторию. По траектории частиц выносятся суждения о концентрации.

Объект исследования – подходы численного решения задачи переноса примеси. Цель работы – изучение и применение подхода Эйлера и подхода Лагранжа для решения задачи распространения примеси от постоянного источника. Достоверность полученных результатов проверяется сравнением с аналитическим решением.

В представленной работе задача распространения примеси решена обоими подходами. По имеющимся параметрам источника, таким как интенсивность и положение, требовалось определить направление распространения поступающей из него примеси, а также его концентрацию на

территории распространения. Область трехмерная. Характеристики среды не являются точно соответствующими реальным параметрам. Они лишь призваны продемонстрировать применение математических и численных методов решения поставленной задачи.

Поскольку существуют различные аналитические формулы решения задачи, можно провести сравнение точности результатов, полученных при численном решении. В дальнейшем можно усложнять модели, приближая к реальным параметрам, и осуществлять моделирование реальных процессов распространения примеси в атмосфере.

Новизна работы заключается в создании программ для решения задачи, включающих одновременно оба метода и сравнение с аналитическим решением именно для трехмерной области. В существующих работах по теме авторы предпочитают переходить к двумерным задачам, поскольку найти аналитическую формулу для трехмерного случая и адаптировать её под заданные характеристики – непростая задача. Алгоритмы полученных программ позволяют сразу получать и численные результаты, и аналитические, и проводить мгновенное их сравнение. Кроме того, выбор современного языка программирования C++ способствует легкой адаптации готовых программ под многопроцессорные вычислительные системы. Также понять принцип работы программ будет проще другим пользователям, поскольку язык программирования C++ достаточно распространен, а программы на нем легко переносимы.

Кроме этого, в настоящее время набирает обороты симбиоз подхода Эйлера и Лагранжа при решении задач переноса примеси. Освоение обоих методов сразу позволяет понять преимущества и недостатки каждой модели в отдельности и развить далее лагранжево-эйлерову модель решения задачи, чтобы получить более точные результаты в более короткие сроки. Проведенные исследования и созданные программы являются базой для этого.

1 Основные понятия

1.1 Атмосфера

Атмосфера – это газовая оболочка Земли, содержащая аэрозольные частицы, движущаяся вместе с Землей в мировом пространстве [2].

Атмосфера над достаточно большой площадью земного шара, в особенности в средних широтах, представляет собой отчетливо выраженную динамическую систему, в которой движение воздуха определяется главным образом горизонтальными градиентами давления и температуры [3].

Обычно при исследовании атмосферы делят на горизонтальные слои, нижний из которых – приземный слой атмосферы – составляет от 50 до 100 метров, далее идет планетарный пограничный слой – до 500-1000 метров, а далее располагается так называемая свободная атмосфера.

В приземном слое можно пренебрегать влиянием вращения земного шара (то есть не уделять внимания действию силы Кориолиса). Ветер в этой области турбулентен, поверхность может быть разнообразной (что отражает коэффициент шероховатости), являясь короткой травой в области степи или высотными зданиями в области городской застройки.

Тепло в атмосфере распределяется неравномерно, поэтому и давление разнится в разных местах. Из-за разности давления возникает ветер. В нижних слоях атмосферы, где плотность воздуха наиболее велика, на движение атмосферы с ветром оказывает влияние трение.

Систему крупномасштабных воздушных течений на Земле называют общей циркуляцией атмосферы [2]. Она имеет климатообразующее значение. Состав атмосферы является географическим фактором глобального климата, поэтому его изменение (например, вследствие выбросов примесей в атмосферу) непосредственно влияет на климат.

Основными метеорологическими величинами являются температура воздуха, давление, влажность, направление и скорость ветра, осадки,

облачность и проч. Для использования в расчетах их получают эмпирическим путем.

1.2 Математическое моделирование

Моделирование предполагает замену исследуемого объекта условным образом, описанием или другим объектом, называемым моделью, имеющим сходное поведение с оригиналом при некоторых допущениях и погрешностях. Интересующие исследователя свойства объекта и модели должны совпадать, несущественными деталями можно пренебречь.

Математическая модель – это приближённое описание реальных объектов или явлений с помощью математических инструментов.

Для реальных условий исследуемого процесса можно получить численное решение. Численные методы – это раздел вычислительной математики, дающий приближенные способы решения математических задач. Численное решение дает подробную и полную информацию [4]. С его помощью можно найти значения всех имеющихся переменных: скорости, турбулентности, давления, температуры, и, самое главное, концентрации. Для расчета доступна вся исследуемая область без возмущений от датчиков в то время как при эксперименте нельзя измерить все переменные во всей области. По этой причине численное решение может быть полезным дополнением к эмпирической информации.

Одно из важнейших преимуществ численного решения по сравнению с экспериментальным – дешевизна исследования, поскольку затрачиваемое машинное время стоит значительно меньше, чем проведение эксперимента по измерению концентрации примеси, и проводится гораздо быстрее.

Кроме этого, в том случае, когда ставится цель исследования физических закономерностей, а не решаются реальные задачи, гораздо проще работать с численной моделью. Достичь идеализированных условий не всегда можно при эксперименте.

1.3 Физика процессов. Уравнение переноса

Перенос загрязняющих субстанций в атмосфере осуществляется ветровыми потоками воздуха с учетом их мелкомасштабных флуктуаций. Осредненный поток субстанций, переносимых воздушными массами, как правило, имеет адвективную и конвективную составляющие, а осредненные флуктуационные движения можно интерпретировать как диффузию на фоне основного осредненного движения, связанного с ним [5].

Если принять $C(x, y, z, t)$ за концентрацию мигрирующей с воздухом примеси, то перенос этой субстанции вдоль траектории частиц воздуха запишется как

$$\frac{dC}{dt} = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + W \frac{\partial C}{\partial z} = 0,$$

где вектор U, V, W – компоненты вектора скорости частиц $v = Ui + Vj + Wk$, а i, j, k – единичные векторы в направлении осей x, y, z .

Для нижней части атмосферы с хорошей точностью выполняется закон сохранения массы, выраженный уравнением неразрывности:

$$\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} + \frac{\partial W}{\partial z} = 0$$

Используем формулу

$$U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + W \frac{\partial C}{\partial z} = \operatorname{div} vC - C \operatorname{div} v$$

и будем считать $\operatorname{div} v = 0$.

Отсюда

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \operatorname{div} vC = 0.$$

Обобщим уравнение на случай, когда часть субстанции реагирует с внешней средой или распадается, тогда можно добавить слагаемое «поглощение»:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \operatorname{div} vC + \sigma C = 0$$

Если задача предполагает наличие источников, характеризуемых функцией $f(x, y, z, t)$, то уравнение принимает вид:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \text{div } vC + \sigma C = f$$

Предположим, что любая функция может быть представлена в виде осредненной компоненты и много меньшей её флуктуационной компоненты:

$$\tilde{a} = \bar{a} + a'$$

Поскольку в атмосфере примесь расплывается из-за турбулентности, требуется добавление флуктуационного момента

$$\text{div } \widetilde{vC},$$

где компоненты $\widetilde{vC}$ таковы:

$$\widetilde{UC} = -\Gamma^x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x}, \widetilde{VC} = -\Gamma^y \frac{\partial \bar{C}}{\partial y}, \widetilde{WC} = -K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z},$$

$\Gamma^x = \Gamma^y, K_z$ – горизонтальные и вертикальный коэффициенты диффузии, неотрицательны.

Добавляем новое слагаемое

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + \text{div } vC + \sigma C + \text{div } \widetilde{vC} &= f \Leftrightarrow \\ \frac{\partial C}{\partial t} + \text{div } vC + \sigma C - \frac{\partial}{\partial x} \Gamma^x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} \Gamma^y \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial z} K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} &= f \end{aligned}$$

К этому уравнению добавляются начальные и граничные значения.

1.4 Физика процессов. Турбулентность

Почти все естественные движения как в воздухе, так и в воде турбулентны. Турбулентный поток есть движение, включающее случайные колебания конечного размера; эти колебания приводят к пульсациям в траектории частицы [3].

В течение суток температура поверхности изменяется: сначала она нагревается солнцем, затем отдает тепло. Это оказывает влияние на воздушный поток.

Если солнце светит достаточно ярко и поверхность нагревается сильнее примыкающего воздуха, ветер становится сильно турбулентным. После захода солнца земля быстро остывает и становится холоднее воздуха, поэтому атмосфера около земли охлаждается и уплотняется. Турбулентность поддерживается только отдельными частицами воздуха, мигрирующими по вертикали, это непрерывный процесс. Интенсивность турбулентного движения уменьшается. Затем солнце вновь нагревает землю, поэтому вскоре после рассвета близкий к ламинарному (частицы движутся по прямым линиям) поток уступает место турбулентному движению, которое продолжается весь день [3].

Одна из основных характеристик в теории турбулентных колебаний – динамическая скорость (скорость трения)

$$u_* = \sqrt{\left| \frac{\tau}{\rho} \right|},$$

где τ – касательное напряжение поверхности, ρ – плотность воздуха.

При турбулентном движении касательное напряжение пропорционально средней скорости в квадрате (при ламинарном – первой степени скорости). Это соотношение приближенное.

Нравне с этим используется понятие конвективного масштаба скорости

$$w_* = \sqrt[3]{\frac{hg}{\theta} w \vartheta_0}$$

В формулу входят

$h = 100$ м – высота слоя перемешивания;

$g \approx 9,8$ – ускорение свободного падения;

θ – температура;

$$\overline{w\vartheta_0} = -u_*\vartheta_*;$$

ϑ_* – характерный масштаб температуры в теории подобия Мони́на-Обухова.

Обычно применяемое при расчетах значение постоянной Кармана составляет

$$\kappa = 0,4 \pm 0,04.$$

Обуховский масштаб длины имеет огромное влияние. Формула для числа Мони́на-Обухова:

$$L = \frac{-\theta u_*^3}{g \kappa w \vartheta_0}$$

$|L|$ указывает на отклонение от статически нейтрального состояния. Чем меньше модуль числа, тем больше отклонение от нейтрального.

$L > 0$ при устойчивой стратификации атмосферы;

$L = 0$ при нейтральной;

$L < 0$ при неустойчивой стратификации.

Вертикальное распространение температуры в атмосфере может быть различным. Фактически оно не подчинено никакой простой закономерности. Кривая фактического распределения температуры с высотой в данный момент времени называется кривой стратификации. Данные для её построения получают с помощью радиозондов при аэрологическом зондировании атмосферы [2]. Представление о характере кривой дает вертикальный градиент температуры:

$$\gamma = -\frac{dT_a}{dz}$$

то есть изменение температуры в атмосфере на единицу высоты, обычно на 100 метров. Градиент температуры положителен при падении температуры с высотой (условие неустойчивости атмосферы), отрицателен при увеличении

(условие устойчивости атмосферы). При равенстве вертикального градиента нулю температура в таком слое атмосферы не меняется при изменении высоты (нейтральные условия атмосферы).

2 Эйлеров подход распространения примеси

Моделирование переноса газообразной примеси в атмосфере осуществляется с помощью трехмерного уравнения переноса с заданными граничными условиями. Уравнение включает диффузионные параметры среды и скорость ветра и позволяет получить концентрацию примеси.

2.1 Постановка задачи

Физическая

По заданным параметрам положения в пространстве и интенсивности источника требуется найти концентрацию распространившейся из него примеси. В качестве источника рассматривается труба некоторой высоты (Рисунок 1).

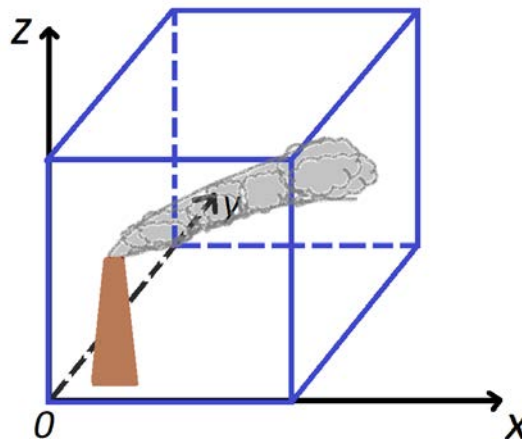


Рисунок 1 – Источник и область распространения примеси

Источник располагается внутри некоторого объема пространства $[0, L_x][0, L_y][0, L_z]$.

Математическая

Адвективно-диффузионное уравнение, моделирующее перенос газообразной примеси в заданном потоке, представляется в следующем виде [5]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + W \frac{\partial C}{\partial z} + \sigma C = \frac{\partial}{\partial x} \left[\Gamma^x \frac{\partial C}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\Gamma^y \frac{\partial C}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right] + Q$$

где

$[C] = \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ – концентрация примеси. C зависит от x, y, z, t ;

x, y, z – координаты в правой системе координат;

t – время;

U, V, W – компоненты вектора скорости в направлении x, y, z соответственно;

$[\sigma] = \frac{1}{c}$ – интенсивность влажного осаждения (вымывания осадками) примеси (величина, обратная интервалу времени, за который концентрация субстанции уменьшится в e раз по сравнению с начальной);

$[\Gamma^x] = [\Gamma^y] = \frac{\text{м}^2}{c}$ – горизонтальные коэффициенты турбулентной диффузии, равные количеству вещества (в массовых единицах), проходящего в единицу времени через участок единичной площади в результате движения молекул;

K_z – вертикальный коэффициент турбулентной диффузии;

$[Q] = \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ – интенсивность источника. От вида функции Q зависит, постоянный источник (то есть непрерывно выбрасывающий примесь) или нет (то есть выбрасывающий примесь в один определенный момент времени).

Граничные условия

В начальный момент времени концентрация примеси в области нет:

$$t = 0, C = 0;$$

$$x = 0, y = 0: C = 0; z = 0: \frac{\partial C}{\partial z} = 0$$

$$x = Lx, y = Ly, z = Lz: \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial y} = \frac{\partial C}{\partial z} = 0;$$

Упрощения

Задача решается в условиях отсутствия осадков, поэтому коэффициент интенсивности влажного осаждения принимаем равным нулю: $\sigma = 0$.

Вертикальная компонента ветра может быть принята равной нулю, поскольку считается, что ветер распространяется только горизонтально.

Источник либо выбрасывает заданное количество примеси одномоментно, либо работает постоянно, выбрасывая одинаковое количество

примеси в единицу времени. Далее решается задача для постоянного источника.

2.2 Численные схемы решения задачи

Для нахождения решения в заданной области пространства проведем дискретизацию. Область непрерывного изменения аргументов $x \in [0, Lx]$, $y \in [0, Ly]$ и $z \in [0, Lz]$ заменим сеточной. Делим интервалы Lx, Ly и Lz на Nx, Ny и Nz равных частей соответственно. Середина каждого интервала – это координата точки, в которой вычисляется значение концентрации. Получаем область-параллелепипед, состоящий из $Nx \times Ny \times Nz$ шт. параллелепипедов равного объёма (Рисунок 2). Каждому параллелепипеду присваивается значение концентрации в его центральной точке.

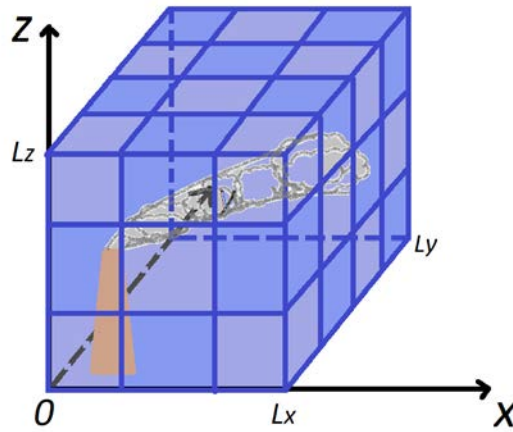


Рисунок 2 – Разбиение области на подобласти

Тогда значения концентрации находятся в точках с координатами $\{X, Y, Z\}$, где

$$X = \{x_i: x_i = (i + 0.5)h_x, i = \overline{0, Nx - 1}, h_x = Lx/Nx\},$$

$$Y = \{y_i: y_i = (j + 0.5)h_y, j = \overline{0, Ny - 1}, h_y = Ly/Ny\},$$

$$Z = \{z_i: z_i = (k + 0.5)h_z, k = \overline{0, Nz - 1}, h_z = Lz/Nz\}.$$

Границы областей задаются множествами

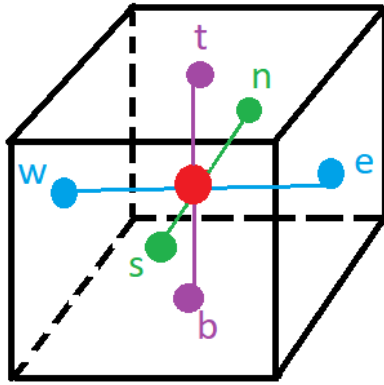
$$Xgr = \{x_i: x_i = ih_x, i = \overline{0, Nx}, h_x = Lx/Nx\},$$

$$Ygr = \{y_i: y_i = jh_y, j = \overline{0, Ny}, h_y = Ly/Ny\},$$

$$Zgr = \{z_i: z_i = kh_z, k = \overline{0, Nz}, h_z = Lz/Nz\}.$$

Дискретизация по времени имеет вид $t_0 \leq i\tau \leq T$, где t_0 – начальное время расчетов, T – конечное время расчетов, $\tau = T/Nt$ – шаг по времени, Nt – количество разбиений временного интервала, $i = \overline{0, Nt}$.

Для решения задачи требуется проинтегрировать каждый член уравнения по времени и пространству (в каждом маленьком параллелепипеде). Введем представленные на рисунке 3 обозначения для границ.



$x_w = x_{west}$ – западная граница;

$x_e = x_{east}$ – восточная граница;

$y_s = x_{south}$ – южная граница;

$y_n = x_{north}$ – северная граница;

$z_b = x_{bottom}$ – нижняя граница;

$z_t = x_{top}$ – верхняя граница;

(x_i, y_j, z_k) – центр конечного объема параллелепипеда.

Рисунок 3 – Обозначения точек на границах конечных объёмов

Аппроксимация нестационарного члена уравнения

$$\begin{aligned}
 & \int_{t^n}^{t^{n+\tau}} \int_{z_b}^{z_t} \int_{y_s}^{y_n} \int_{x_w}^{x_e} \frac{\partial C}{\partial t} dx dy dz dt = \\
 & = |\text{порядок интегрирования можно менять}| = \\
 & = \int_{z_b}^{z_t} \int_{y_s}^{y_n} \int_{x_w}^{x_e} \int_{t^n}^{t^{n+\tau}} \frac{\partial C}{\partial t} dt dx dy dz \\
 & = \int_{z_b}^{z_t} \int_{y_s}^{y_n} \int_{x_w}^{x_e} [C(x, y, z, t^n + \tau) - C(x, y, z, t^n)] dx dy dz
 \end{aligned}$$

Для взятия интеграла по x, y, z используем формулу метода средних прямоугольников [6]:

$$\int_a^b f(x)dx \approx f\left(\frac{a+b}{2}\right)(b-a)$$

Сетка равномерная и имеет вид (Рисунок 4):

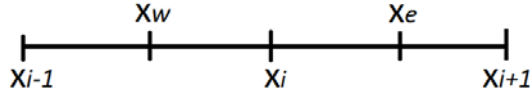


Рисунок 4 – Схема обозначений для точек

$$\frac{x_w + x_e}{2} = x_i, x_w = x_{i-\frac{1}{2}}, x_e = x_{i+\frac{1}{2}}, |x_w - x_{i-1}| = |x_i - x_w| = |x_e - x_i| = |x_{i+1} - x_e| = h_x/2.$$

$$\int_{x_w}^{x_e} C(x, y, z, t^n + \tau) dx = C(x_i, y, z, t^n + \tau)(x_e - x_w) = C(x_i, y, z, t^n + \tau)h_x$$

Аналогично интегрируем это слагаемое по y и z , затем второе слагаемое по всем трем переменным и получаем:

$$\int_{t^n}^{t^n + \tau} \int_{z_b}^{z_t} \int_{y_s}^{y_n} \int_{x_w}^{x_e} \frac{\partial C}{\partial t} dx dy dz dt = [C(x_i, y_j, z_k, t^n + \tau) - C(x_i, y_j, z_k, t^n)]h_x h_y h_z$$

Аппроксимация адвективных членов уравнения

Аппроксимация второго-четвертого членов уравнения может осуществляться с помощью различных численных схем, например, UPWIND, схема MLU Ван Лира, схема Ботта. Применим противопотоковую схему UPWIND. При использовании для адвективных членов уравнения схемы против потока предполагается, что значение функции на грани конечного объёма рассчитывается по значению функции в узле, находящемся с «подветренной» стороны.

Аппроксимация второго члена уравнения

Значения U могут отличаться на гранях конечного объёма, это и означает «подветренность». Для аппроксимации интеграла по времени используем формулу метода левых прямоугольников [6]:

$$\int_a^b f(x)dx \approx f(a)(b - a).$$

Для y и z используем формулу средних прямоугольников, где

$$\frac{y_s + y_n}{2} = y_j, \frac{z_b + z_t}{2} = z_k.$$

$$\begin{aligned} \int_{t^n}^{t^n+\tau} \int_{z_b}^{z_t} \int_{y_s}^{y_n} \int_{x_w}^{x_e} U \frac{\partial C}{\partial x} dx dy dz dt &= \int_{t^n}^{t^n+\tau} \int_{z_b}^{z_t} \int_{y_s}^{y_n} [U_e C(x_e, y, z, t) - \\ &U_w C(x_w, y, z, t)] dy dz dt = \int_{t^n}^{t^n+\tau} [U_e C(x_e, y_j, z_k, t) - \\ &U_w C(x_w, y_j, z_k, t)] h_y h_z dt = [U_e C(x_e, y_j, z_k, t^n) - U_w C(x_w, y_j, z_k, t^n)] h_y h_z \tau. \end{aligned}$$

Для аппроксимации $U_e C(x_e, y_j, z_k, t^n)$ используем противопотоковую схему UPWIND. Предполагается, что значение функции на грани конечного объёма рассчитывается по значению функции в узле, находящемся с «подветренной» стороны (Рисунок 5):

$$U_e C(x_e, y_j, z_k, t^n) = \begin{cases} U_e C(x_i, y_j, z_k, t^n), & U_e \geq 0 \\ U_e C(x_{i+1}, y_j, z_k, t^n), & U_e < 0 \end{cases}$$

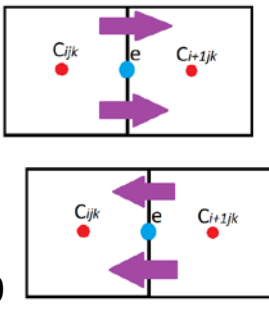


Рисунок 5 – Схема аппроксимации слагаемого в зависимости от направления ветра

Выбирается то значение концентрации, которое ветер приносит на границу.

Общая формула имеет вид:

$$\begin{aligned} U_e C(x_e, y_j, z_k, t^n) &= \max(U_e, 0) * C(x_i, y_j, z_k, t^n) - \max(-U_e, 0) * \\ &C(x_{i+1}, y_j, z_k, t^n). \end{aligned}$$

Аналогично аппроксимируем $U_w C(x_w, y_j, z_k, t^n)$ (Рисунок 6):

$$U_w C(x_w, y_j, z_k, t^n) = \begin{cases} U_w C(x_{i-1}, y_j, z_k, t^n), U_w \geq 0 \\ U_w C(x_i, y_j, z_k, t^n), U_w < 0 \end{cases}$$

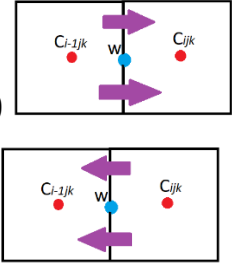


Рисунок 6 – Схема аппроксимации слагаемого в зависимости от направления ветра

Общая формула имеет вид:

$$U_w C(x_w, y_j, z_k, t^n) = \max(U_w, 0) * C(x_{i-1}, y_j, z_k, t^n) - \max(-U_w, 0) * C(x_i, y_j, z_k, t^n).$$

Итоговое выражение для второго члена:

$$\begin{aligned} & \int_{t^n}^{t^n+\tau} \int_{z_b}^{z_t} \int_{y_s}^{y_n} \int_{x_w}^{x_e} U \frac{\partial C}{\partial x} dx dy dz dt = \\ & = [\max(U_e, 0) * C(x_i, y_j, z_k, t^n) - \max(-U_e, 0) * C(x_{i+1}, y_j, z_k, t^n) - \\ & \max(U_w, 0) * C(x_{i-1}, y_j, z_k, t^n) + \max(-U_w, 0) * C(x_i, y_j, z_k, t^n)] h_y h_z \tau = \\ & [(\max(U_e, 0) + \max(-U_w, 0)) * C(x_i, y_j, z_k, t^n) - \max(-U_e, 0) * \\ & C(x_{i+1}, y_j, z_k, t^n) - \max(U_w, 0) * C(x_{i-1}, y_j, z_k, t^n)] h_y h_z \tau. \end{aligned}$$

Аппроксимация третьего члена уравнения

Все выкладки проводятся по аналогии со вторым членом уравнения.

$$\int_{t^n}^{t^n+\tau} \int_{z_b}^{z_t} \int_{y_s}^{y_n} \int_{x_w}^{x_e} V \frac{\partial C}{\partial y} dx dy dz dt = [V_n C(x_i, y_n, z_k, t^n) - V_s C(x_i, y_s, z_k, t^n)] h_x h_z \tau.$$

Формулы для аппроксимации $V_n C(x_i, y_n, z_k, t^n)$ и $V_s C(x_i, y_s, z_k, t^n)$ с помощью схемы UPWIND:

$$V_n C(x_i, y_n, z_k, t^n) = \begin{cases} V_n C(x_i, y_j, z_k, t^n), V_n \geq 0 \\ V_n C(x_i, y_{j+1}, z_k, t^n), V_n < 0 \end{cases}$$

Общая формула имеет вид:

$$V_n C(x_i, y_n, z_k, t^n) = \max(V_n, 0) * C(x_i, y_j, z_k, t^n) - \max(-V_n, 0) * C(x_i, y_{j+1}, z_k, t^n).$$

Аналогично аппроксимируем $V_s C(x_i, y_s, z_k, t^n)$:

$$V_s C(x_i, y_s, z_k, t^n) = \begin{cases} V_s C(x_i, y_{j-1}, z_k, t^n), & V_s \geq 0 \\ V_s C(x_i, y_j, z_k, t^n), & V_s < 0 \end{cases}$$

Общая формула имеет вид:

$$V_s C(x_i, y_s, z_k, t^n) = \max(V_s, 0) * C(x_i, y_{j-1}, z_k, t^n) - \max(-V_s, 0) * V_s C(x_i, y_j, z_k, t^n)$$

Итоговое выражение для третьего члена:

$$\begin{aligned} \int_{t^n}^{t^n+\tau} \int_{z_b}^{z_t} \int_{y_s}^{y_n} \int_{x_w}^{x_e} V \frac{\partial C}{\partial y} dx dy dz dt &= [V_n C(x_i, y_n, z_k, t^n) - V_s C(x_i, y_s, z_k, t^n)] h_x h_z \tau \\ &= [\max(V_n, 0) * C(x_i, y_j, z_k, t^n) - \max(-V_n, 0) * C(x_i, y_{j+1}, z_k, t^n) - \\ &\max(V_s, 0) * C(x_i, y_{j-1}, z_k, t^n) + \max(-V_s, 0) * V_s C(x_i, y_j, z_k, t^n)] h_x h_z \tau = \\ &[(\max(V_n, 0) + \max(-V_s, 0)) * C(x_i, y_j, z_k, t^n) - \max(-V_n, 0) * \\ &C(x_i, y_{j+1}, z_k, t^n) - \max(V_s, 0) * C(x_i, y_{j-1}, z_k, t^n)] h_x h_z \tau. \end{aligned}$$

Аппроксимация четвертого члена уравнения

Все выкладки проводятся по аналогии со вторым и третьим членами уравнения.

$$\begin{aligned} \int_{t^n}^{t^n+\tau} \int_{z_b}^{z_t} \int_{y_s}^{y_n} \int_{x_w}^{x_e} W \frac{\partial C}{\partial z} dx dy dz dt \\ = [W_t C(x_i, y_j, z_t, t^n) - W_b C(x_i, y_j, z_b, t^n)] h_x h_y \tau \end{aligned}$$

Формулы для аппроксимации $W_t C(x_i, y_j, z_t, t^n)$ и $W_b C(x_i, y_j, z_b, t^n)$ с помощью схемы UPWIND:

$$W_t C(x_i, y_j, z_t, t^n) = \begin{cases} W_t C(x_i, y_j, z_k, t^n), & W_t \geq 0 \\ W_t C(x_i, y_j, z_{k+1}, t^n), & W_t < 0 \end{cases}$$

Общая формула имеет вид:

$$W_t C(x_i, y_j, z_t, t^n) \\ = \max(W_t, 0) * C(x_i, y_j, z_k, t^n) - \max(-W_t, 0) * C(x_i, y_j, z_{k+1}, t^n)$$

Аналогично аппроксимируем $W_b C(x_i, y_j, z_b, t^n)$:

$$W_b C(x_i, y_j, z_b, t^n) = \begin{cases} W_b C(x_i, y_j, z_{k-1}, t^n), & W_b \geq 0 \\ W_b C(x_i, y_j, z_k, t^n), & W_b < 0 \end{cases}$$

Общая формула имеет вид:

$$W_b C(x_i, y_j, z_k, t^n) \\ = \max(W_b, 0) * C(x_i, y_j, z_{k-1}, t^n) - \max(-W_b, 0) * C(x_i, y_j, z_k, t^n)$$

Итоговое выражение для четвертого члена:

$$\int_{t^n}^{t^n+\tau} \int_{z_b}^{z_t} \int_{y_s}^{y_n} \int_{x_w}^{x_e} W \frac{\partial C}{\partial z} dx dy dz dt = [W_t C(x_i, y_j, z_k, t^n) - \\ W_b C(x_i, y_j, z_b, t^n)] h_x h_y \tau = [\max(W_t, 0) * C(x_i, y_j, z_k, t^n) - \max(-W_t, 0) * \\ C(x_i, y_j, z_{k+1}, t^n) - \max(W_b, 0) * C(x_i, y_j, z_{k-1}, t^n) + \max(-W_b, 0) * \\ C(x_i, y_j, z_k, t^n)] h_x h_y \tau = [(\max(W_t, 0) + \max(-W_b, 0)) * C(x_i, y_j, z_k, t^n) - \\ \max(-W_t, 0) * C(x_i, y_j, z_{k+1}, t^n) - \max(W_b, 0) * C(x_i, y_j, z_{k-1}, t^n)] h_x h_y \tau.$$

Аппроксимация диффузионных слагаемых

Аппроксимация первого (после равно) диффузионного слагаемого

Предполагается, что коэффициент турбулентной диффузии Γ^x остается постоянным во всей области, поэтому из-под знака интегрирования его можно вынести.

$$\int_{t^n}^{t^n+\tau} \int_{z_b}^{z_t} \int_{y_s}^{y_n} \int_{x_w}^{x_e} \frac{\partial}{\partial x} \left[\Gamma^x \frac{\partial C}{\partial x} \right] dx dy dz dt = \Gamma^x \int_{t^n}^{t^n+\tau} \int_{z_b}^{z_t} \int_{y_s}^{y_n} \int_{x_w}^{x_e} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} dx dy dz dt = \\ \Gamma^x \int_{t^n}^{t^n+\tau} \int_{z_b}^{z_t} \int_{y_s}^{y_n} \left[\frac{\partial C(x_e, y, z, t)}{\partial x} - \frac{\partial C(x_w, y, z, t)}{\partial x} \right] dy dz dt = \\ \Gamma^x \int_{t^n}^{t^n+\tau} \int_{z_b}^{z_t} \int_{y_s}^{y_n} \left[\frac{\partial C(x_{i+\frac{1}{2}}, y, z, t)}{\partial x} - \frac{\partial C(x_{i-\frac{1}{2}}, y, z, t)}{\partial x} \right] dy dz dt.$$

Для нахождения интегралов от $\frac{\partial C(x_e, y, z, t)}{\partial x}$ и $\frac{\partial C(x_w, y, z, t)}{\partial x}$ используем формулу центральной разностной производной:

$$y'(x) = \frac{y(x+\Delta x) - y(x-\Delta x)}{2\Delta x}.$$

Тогда

$$\begin{aligned} & \Gamma^x \int_{t^n}^{t^{n+\tau}} \int_{z_b}^{z_t} \int_{y_s}^{y_n} \left[\frac{C\left(x_{i+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}}, y, z, t\right) - C\left(x_{i+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}, y, z, t\right)}{2 * \frac{h_x}{2}} \right] - \\ & \left[\frac{C\left(x_{i-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}}, y, z, t\right) - C\left(x_{i-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}, y, z, t\right)}{2 * \frac{h_x}{2}} \right] dy dz dt = \\ & = \Gamma^x \int_{t^n}^{t^{n+\tau}} \int_{z_b}^{z_t} \int_{y_s}^{y_n} \left[\frac{C(x_{i+1}, y, z, t) - C(x_i, y, z, t) - C(x_i, y, z, t) + C(x_{i-1}, y, z, t)}{h_x} \right] dy dz dt = \\ & = \Gamma^x \int_{t^n}^{t^{n+\tau}} \int_{z_b}^{z_t} \int_{y_s}^{y_n} \left[\frac{C(x_{i+1}, y, z, t) - 2C(x_i, y, z, t) + C(x_{i-1}, y, z, t)}{h_x} \right] dy dz dt = \end{aligned}$$

=|для взятия интеграла по y, z используем формулу метода средних прямоугольников|=

$$\begin{aligned} & = \frac{\Gamma^x}{h_x} \int_{t^n}^{t^{n+\tau}} [C(x_{i+1}, y_j, z_k, t) - 2C(x_i, y_j, z_k, t) + \\ & C(x_{i-1}, y_j, z_k, t)] h_y h_z dt = \end{aligned}$$

=|для взятия интеграла по времени используем формулу метода левых прямоугольников|=

$$= \frac{\Gamma^x}{h_x} [C(x_{i+1}, y_j, z_k, t^n) - 2C(x_i, y_j, z_k, t^n) + C(x_{i-1}, y_j, z_k, t^n)] h_y h_z \tau.$$

Итог:

$$\begin{aligned} & \int_{t^n}^{t^{n+\tau}} \int_{z_b}^{z_t} \int_{y_s}^{y_n} \int_{x_w}^{x_e} \frac{\partial}{\partial x} \left[\Gamma^x \frac{\partial C}{\partial x} \right] dx dy dz dt = \frac{\Gamma^x}{h_x} [C(x_{i+1}, y_j, z_k, t^n) - \\ & 2C(x_i, y_j, z_k, t^n) + C(x_{i-1}, y_j, z_k, t^n)] h_y h_z \tau. \end{aligned}$$

Аппроксимация второго после равно слагаемого

По аналогии с предыдущим слагаемым получаем:

$$\begin{aligned} & \int_{t^n}^{t^{n+\tau}} \int_{z_b}^{z_t} \int_{y_s}^{y_n} \int_{x_w}^{x_e} \frac{\partial}{\partial y} \left[\Gamma^y \frac{\partial C}{\partial y} \right] dx dy dz dt = \frac{\Gamma^y}{h_y} [C(x_i, y_{j+1}, z_k, t^n) - \\ & 2C(x_i, y_j, z_k, t^n) + C(x_i, y_{j-1}, z_k, t^n)] h_x h_z \tau. \end{aligned}$$

Аппроксимация третьего после равно слагаемого

Полагаем, что коэффициент турбулентной диффузии K_z остается постоянным, тогда:

$$\int_{t^n}^{t^{n+\tau}} \int_{z_b}^{z_t} \int_{y_s}^{y_n} \int_{x_w}^{x_e} \frac{\partial}{\partial z} \left[K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right] dx dy dz dt = \frac{K_z}{h_z} [C(x_i, y_j, z_{k+1}, t^n) - 2C(x_i, y_j, z_k, t^n) + C(x_i, y_j, z_{k-1}, t^n)] h_x h_y \tau.$$

Аппроксимация источникового члена

Формула для постоянного (непрерывного источника). Слагаемое добавляется на каждом временном шаге, но только в том параллелепипеде, в который попадает верхушка источника.

$$\int_{t^n}^{t^{n+\tau}} \int_{z_b}^{z_t} \int_{y_s}^{y_n} \int_{x_w}^{x_e} Q dx dy dz dt = Q h_x h_y h_z \tau.$$

Формула для источника, сработавшего в момент времени t_0 . Добавляется только в момент времени t_0 и только в тот параллелепипед, в котором находится верхушка источника.

$$\int_{t^n}^{t^{n+\tau}} \int_{z_b}^{z_t} \int_{y_s}^{y_n} \int_{x_w}^{x_e} Q dx dy dz dt = Q h_x h_y h_z.$$

Полученная разностная схема

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + W \frac{\partial C}{\partial z} + \sigma C = \frac{\partial}{\partial x} \left[\Gamma^x \frac{\partial C}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\Gamma^y \frac{\partial C}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right] + Q$$

ЭКВИВАЛЕНТНО

$$\begin{aligned} & [C(x_i, y_j, z_k, t^n + \tau) - C(x_i, y_j, z_k, t^n)] h_x h_y h_z + [(\max(U_e, 0) + \max(-U_w, 0)) * C(x_i, y_j, z_k, t^n) - \max(-U_e, 0) * C(x_{i+1}, y_j, z_k, t^n) - \\ & \max(U_w, 0) * C(x_{i-1}, y_j, z_k, t^n)] h_y h_z \tau + [(\max(V_n, 0) + \max(-V_s, 0)) * \\ & C(x_i, y_j, z_k, t^n) - \max(-V_n, 0) * C(x_i, y_{j+1}, z_k, t^n) - \max(V_s, 0) * \\ & C(x_i, y_{j-1}, z_k, t^n)] h_x h_z \tau + [(\max(W_t, 0) + \max(-W_b, 0)) * C(x_i, y_j, z_k, t^n) - \\ & \max(-W_t, 0) * C(x_i, y_j, z_{k+1}, t^n) - \max(W_b, 0) * C(x_i, y_j, z_{k-1}, t^n)] h_x h_y \tau = \\ & \frac{\Gamma^x}{h_x} [C(x_{i+1}, y_j, z_k, t^n) - 2C(x_i, y_j, z_k, t^n) + C(x_{i-1}, y_j, z_k, t^n)] h_y h_z \tau + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\Gamma_y}{h_y} [C(x_i, y_{j+1}, z_k, t^n) - 2C(x_i, y_j, z_k, t^n) + C(x_i, y_{j-1}, z_k, t^n)] h_x h_z \tau + \\ & \frac{K_z}{h_z} [C(x_i, y_j, z_{k+1}, t^n) - 2C(x_i, y_j, z_k, t^n) + C(x_i, y_j, z_{k-1}, t^n)] h_x h_y \tau + \\ & Q(x_i, y_j, z_k, t^n) h_x h_y h_z \tau. \end{aligned}$$

Обозначим $C(x_i, y_j, z_k, t^n) = C_{ijk}^n$, тогда:

$$\begin{aligned} & [C_{ijk}^{n+1} - C_{ijk}^n] h_x h_y h_z + [(\max(U_e, 0) + \max(-U_w, 0)) C_{ijk}^n - \\ & \max(-U_e, 0) C_{i+1jk}^n - \max(U_w, 0) C_{i-1jk}^n] h_y h_z \tau + [(\max(V_n, 0) + \\ & \max(-V_s, 0)) C_{ijk}^n - \max(-V_n, 0) C_{ij+1k}^n - \max(V_s, 0) C_{ij-1k}^n] h_x h_z \tau + \\ & [(\max(W_t, 0) + \max(-W_b, 0)) C_{ijk}^n - \max(-W_t, 0) C_{ijk+1}^n - \max(W_b, 0) * \\ & C_{ijk-1}^n] h_x h_y \tau = \frac{\Gamma_x}{h_x} [C_{i+1jk}^n - 2C_{ijk}^n + C_{i-1jk}^n] h_y h_z \tau + \frac{\Gamma_y}{h_y} [C_{ij+1k}^n - 2C_{ijk}^n + \\ & C_{ij-1k}^n] h_x h_z \tau + \frac{K_z}{h_z} [C_{ijk+1}^n - 2C_{ijk}^n + C_{ijk-1}^n] h_x h_y \tau + Q(x_i, y_i, z_i, t^n) h_x h_y h_z \tau. \end{aligned}$$

Отсюда выражение для следующего шага по времени:

$$\begin{aligned} C_{ijk}^{n+1} = C_{ijk}^n - & \frac{[(\max(U_e, 0) + \max(-U_w, 0)) C_{ijk}^n - \max(-U_e, 0) C_{i+1jk}^n - \max(U_w, 0) C_{i-1jk}^n] h_y h_z \tau}{h_x h_y h_z} - \\ & \frac{[(\max(V_n, 0) + \max(-V_s, 0)) C_{ijk}^n - \max(-V_n, 0) C_{ij+1k}^n - \max(V_s, 0) C_{ij-1k}^n] h_x h_z \tau}{h_x h_y h_z} - \\ & \frac{[(\max(W_t, 0) + \max(-W_b, 0)) C_{ijk}^n - \max(-W_t, 0) C_{ijk+1}^n - \max(W_b, 0) * C_{ijk-1}^n] h_x h_y \tau}{h_x h_y h_z} + \\ & \frac{\Gamma_x}{h_x h_y h_z h_x} [C_{i+1jk}^n - 2C_{ijk}^n + C_{i-1jk}^n] h_y h_z \tau + \frac{\Gamma_y}{h_x h_y h_z h_y} [C_{ij+1k}^n - 2C_{ijk}^n + \\ & C_{ij-1k}^n] h_x h_z \tau + \frac{K_z}{h_x h_y h_z h_z} [C_{ijk+1}^n - 2C_{ijk}^n + C_{ijk-1}^n] h_x h_y \tau + \\ Q(x_i, y_i, z_i, t^n) h_x h_y h_z \tau = & C_{ijk}^n - \frac{\tau C_{ijk}^n}{h_x h_y h_z} [(\max(U_e, 0) + \max(-U_w, 0)) h_y h_z + \\ & (\max(V_n, 0) + \max(-V_s, 0)) h_x h_z + (\max(W_t, 0) + \max(-W_b, 0)) h_x h_y] - \\ & \frac{[-\max(-U_e, 0) C_{i+1jk}^n - \max(U_w, 0) C_{i-1jk}^n] \tau}{h_x} - \frac{[-\max(-V_n, 0) C_{ij+1k}^n - \max(V_s, 0) C_{ij-1k}^n] \tau}{h_y} - \\ & \frac{[-\max(-W_t, 0) C_{ijk+1}^n - \max(W_b, 0) * C_{ijk-1}^n] \tau}{h_z} + \frac{\Gamma_x}{h_x^2} [C_{i+1jk}^n - 2C_{ijk}^n + C_{i-1jk}^n] \tau + \\ & \frac{\Gamma_y}{h_y^2} [C_{ij+1k}^n - 2C_{ijk}^n + C_{ij-1k}^n] \tau + \frac{K_z}{h_z^2} [C_{ijk+1}^n - 2C_{ijk}^n + C_{ijk-1}^n] \tau + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Q(x_i, y_i, z_i, t^n) h_x h_y h_z \tau &= C_{ijk}^n - \frac{\tau C_{ijk}^n}{h_x h_y h_z} [(\max(U_e, 0) + \max(-U_w, 0)) h_y h_z + \\
&(\max(V_n, 0) + \max(-V_s, 0)) h_x h_z + (\max(W_t, 0) + \max(-W_b, 0)) h_x h_y] + \\
&\frac{\tau \max(-U_e, 0) C_{i+1jk}^n}{h_x} + \frac{\tau \max(U_w, 0) C_{i-1jk}^n}{h_x} + \frac{\tau \max(-V_n, 0) C_{ij+1k}^n}{h_y} + \frac{\tau \max(V_s, 0) C_{ij-1k}^n}{h_y} + \\
&\frac{\tau \max(-W_t, 0) C_{ijk+1}^n}{h_z} + \frac{\tau \max(W_b, 0) C_{ijk-1}^n}{h_z} + \frac{\Gamma_x}{h_x^2} [C_{i+1jk}^n - 2C_{ijk}^n + C_{i-1jk}^n] \tau + \\
&\frac{\Gamma_y}{h_y^2} [C_{ij+1k}^n - 2C_{ijk}^n + C_{ij-1k}^n] \tau + \frac{K_z}{h_z^2} [C_{ijk+1}^n - 2C_{ijk}^n + C_{ijk-1}^n] \tau + \\
&Q(x_i, y_j, z_i, t^n) h_x h_y h_z \tau.
\end{aligned}$$

2.3 Порядок аппроксимации численной схемы и схемная вязкость

Применим разложение в ряд Тейлора для получения порядка аппроксимации полученной численной схемы и изучения схемной вязкости.

В силу подобия адвективных слагаемых друг другу и диффузионных друг другу, упростим выражение до

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\Gamma^x \frac{\partial C}{\partial x} \right] + Q$$

с дополнительным условием $U = \text{const} > 0$.

Отсюда рассмотрению подлежит выражение

$$\frac{C_{ijk}^{n+1} - C_{ijk}^n}{\tau} + \frac{UC_{ijk}^n - UC_{i-1jk}^n}{h_x} = \frac{\Gamma^x}{h_x^2} [C_{i+1jk}^n - 2C_{ijk}^n + C_{i-1jk}^n] + Q$$

Разложим в ряд Тейлора относительно точки (x_i, y_j, z_k, t^n) :

$$C(x_i, y_j, z_k, t^{n+1}) = C(x_i, y_j, z_k, t^n) + \tau \frac{\partial C}{\partial t}(x_i, y_j, z_k, t^n) + O(\tau^2);$$

$$C(x_{i\pm 1}, y_j, z_k, t^n) = C(x_i, y_j, z_k, t^n) \pm h \frac{\partial C}{\partial x}(x_i, y_j, z_k, t^n) + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}(x_i, y_j, z_k, t^n) + O(h^3).$$

Тогда

$$\frac{C(x_i, y_j, z_k, t^n + \tau) - C(x_i, y_j, z_k, t^n)}{\tau} = \frac{C(x_i, y_j, z_k, t^n) + \tau \frac{\partial C}{\partial t}(x_i, y_j, z_k, t^n) + O(\tau^2) - C(x_i, y_j, z_k, t^n)}{\tau} =$$

$$\frac{\partial C}{\partial t}(x_i, y_j, z_k, t^n) + O(\tau).$$

$$U \frac{C(x_i, y_j, z_k, t^n) - C(x_{i-h}, y_j, z_k, t^n)}{h} =$$

$$U \frac{C(x_i, y_j, z_k, t^n) - C(x_i, y_j, z_k, t^n) + h \frac{\partial C}{\partial x}(x_i, y_j, z_k, t^n) - \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}(x_i, y_j, z_k, t^n) + O(h^3)}{h} =$$

$$U \frac{\partial C}{\partial x}(x_i, y_j, z_k, t^n) - U \frac{h}{2} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}(x_i, y_j, z_k, t^n) + O(h^2).$$

$$\frac{\Gamma^x}{h^2} [C(x_i + h, y_j, z_k, t^n) - 2C(x_i, y_j, z_k, t^n) + C(x_i - h, y_j, z_k, t^n)] =$$

$$\frac{\Gamma^x}{h^2} [C(x_i, y_j, z_k, t^n) + h \frac{\partial C}{\partial x}(x_i, y_j, z_k, t^n) + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}(x_i, y_j, z_k, t^n) + O(h^3) -$$

$$2C(x_i, y_j, z_k, t^n) + C(x_i, y_j, z_k, t^n) - h \frac{\partial C}{\partial x}(x_i, y_j, z_k, t^n) + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}(x_i, y_j, z_k, t^n) + O(h^3) \Big] = \frac{\Gamma^x}{h^2} \left[h^2 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}(x_i, y_j, z_k, t^n) + O(h^3) \right] = \Gamma^x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}(x_i, y_j, z_k, t^n) + O(h).$$

Погрешность аппроксимации

$$\varphi = \frac{\partial C}{\partial t}(x_i, y_j, z_k, t^n) + O(\tau) + U \frac{\partial C}{\partial x}(x_i, y_j, z_k, t^n) - U \frac{h}{2} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}(x_i, y_j, z_k, t^n) + O(h^2) - \Gamma^x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}(x_i, y_j, z_k, t^n) + O(h) - Q.$$

Получен первый порядок аппроксимации по времени и пространству.

Как известно [4], схема с разностями против потока имеет сильную схемную искусственную диффузию. После разложения в ряд Тейлора функция имеет вид:

$$\frac{\partial C}{\partial t}(x_i, y_j, z_k, t^n) + O(\tau) + U \frac{\partial C}{\partial x}(x_i, y_j, z_k, t^n) = U \frac{h}{2} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}(x_i, y_j, z_k, t^n) + O(h^2) + \Gamma^x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}(x_i, y_j, z_k, t^n) + O(h) + Q.$$

И после упрощения:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = (U \frac{h}{2} + \Gamma^x) \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + O(h, \tau) + Q.$$

Слагаемое $U \frac{h}{2}$ является искусственной вязкостью, которую нужно контролировать условием $\Gamma^x \gg U \frac{h}{2}$. Для остальных координат условия выводятся аналогичным образом: $\Gamma^y \gg V \frac{h}{2}, K_z \gg W \frac{h}{2}$.

2.4 Устойчивость численной схемы

Методом гармоник [7] исследуем устойчивость схемы по начальным условиям. По определению это делается для однородных разностных уравнений, т.е.:

$$\frac{C_j^{n+1} - C_j^n}{\tau} + U \frac{C_j^n - C_{j-1}^n}{h} = \Gamma^x \frac{C_{j+1}^n - 2C_j^n + C_{j-1}^n}{h^2}$$

Подставляем $C_j^n = \lambda^n e^{ij\varphi}$ в уравнение. Здесь $i = \sqrt{-1}$, $\varphi \in [0, 2\pi]$, λ – амплитуда колебаний решений на соответствующих слоях.

$$\frac{\lambda^{n+1} e^{ij\varphi} - \lambda^n e^{ij\varphi}}{\tau} + U \frac{\lambda^n e^{ij\varphi} - \lambda^n e^{i(j-1)\varphi}}{h} = \Gamma^x \frac{\lambda^n e^{i(j+1)\varphi} - 2\lambda^n e^{ij\varphi} + \lambda^n e^{i(j-1)\varphi}}{h^2}$$

Умножим выражение на τ и h^2 и сократим на $e^{ij\varphi}$:

$$h^2 \lambda^{n+1} - h^2 \lambda^n + \tau h U (\lambda^n - \lambda^n e^{-i\varphi}) = \Gamma^x \tau (\lambda^n e^{i\varphi} - 2\lambda^n + \lambda^n e^{-i\varphi})$$

Собираем слагаемые с λ^{k+1} с одной стороны, а с λ^k – с другой:

$$h^2 \lambda^{n+1} = \lambda^n (h^2 - \tau h U (1 - e^{-i\varphi}) + \Gamma^x \tau (e^{i\varphi} - 2 + e^{-i\varphi})).$$

Поделим на h^2 :

$$\lambda^{n+1} = \lambda^n \left(\frac{h^2 - \tau h U (1 - e^{-i\varphi})}{h^2} + \frac{\Gamma^x \tau (e^{i\varphi} - 2 + e^{-i\varphi})}{h^2} \right).$$

Множитель перехода от λ^n к λ^{n+1} имеет вид:

$$g = 1 - \frac{\tau}{h} U (1 - e^{-i\varphi}) + \Gamma^x \frac{\tau}{h^2} (e^{i\varphi} - 2 + e^{-i\varphi}).$$

Обозначим $a = \frac{\tau}{h} U$, $b = \Gamma^x \frac{\tau}{h^2}$, тогда

$$g = 1 - a(1 - e^{-i\varphi}) + b(e^{i\varphi} - 2 + e^{-i\varphi}).$$

Используем формулы:

$$e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \sin \varphi,$$

$$e^{-i\varphi} = \cos \varphi - i \sin \varphi,$$

$$1 - \cos \varphi = 2 \sin^2 \frac{\varphi}{2}.$$

Подставляем их:

$$g = 1 - a(1 - \cos \varphi + i \sin \varphi) + b(\cos \varphi + i \sin \varphi - 2 + \cos \varphi - i \sin \varphi);$$

$$g = 1 - a(1 - \cos \varphi + i \sin \varphi) + 2b(\cos \varphi - 1);$$

$$g = 1 - a \left(2 \sin^2 \frac{\varphi}{2} + i \sin \varphi \right) - 4b \sin^2 \frac{\varphi}{2}.$$

Выделим вещественную и мнимую части:

$$g = \left(1 - 2a \sin^2 \frac{\varphi}{2} - 4b \sin^2 \frac{\varphi}{2} \right) - ia \sin \varphi.$$

Далее потребуется формула

$$\sin^2 \varphi = 4 \sin^2 \frac{\varphi}{2} \cos^2 \frac{\varphi}{2} = 4 \sin^2 \frac{\varphi}{2} \left(1 - \sin^2 \frac{\varphi}{2} \right).$$

Оценим квадрат модуля множителя перехода:

$$\begin{aligned} |g|^2 &= \left(1 - 2a \sin^2 \frac{\varphi}{2} - 4b \sin^2 \frac{\varphi}{2} \right)^2 + a^2 \sin^2 \varphi = 1 - 2a \sin^2 \frac{\varphi}{2} - 4b \sin^2 \frac{\varphi}{2} - \\ &\quad 2a \sin^2 \frac{\varphi}{2} + 4a^2 \sin^4 \frac{\varphi}{2} + 8ab \sin^4 \frac{\varphi}{2} - 4b \sin^2 \frac{\varphi}{2} + 8ab \sin^4 \frac{\varphi}{2} + \\ &\quad 16b^2 \sin^4 \frac{\varphi}{2} + 4a^2 \sin^2 \frac{\varphi}{2} \left(1 - \sin^2 \frac{\varphi}{2} \right) = 1 - 4a \sin^2 \frac{\varphi}{2} - 8b \sin^2 \frac{\varphi}{2} + \\ &\quad 4a^2 \sin^4 \frac{\varphi}{2} + 16ab \sin^4 \frac{\varphi}{2} + 16b^2 \sin^4 \frac{\varphi}{2} + 4a^2 \sin^2 \frac{\varphi}{2} - 4a^2 \sin^4 \frac{\varphi}{2} = 1 - \\ &\quad 4a \sin^2 \frac{\varphi}{2} - 8b \sin^2 \frac{\varphi}{2} + 16ab \sin^4 \frac{\varphi}{2} + 16b^2 \sin^4 \frac{\varphi}{2} + 4a^2 \sin^2 \frac{\varphi}{2} \leq 1 - \\ &\quad 4a \sin^2 \frac{\varphi}{2} - 8b + 16ab + 16b^2 + 4a^2 = 1 - 4a \sin^2 \frac{\varphi}{2} - 8b + 4(a + 2b)^2. \end{aligned}$$

Для устойчивости должно выполняться $|g| \leq 1$, то есть

$$1 - 4a \sin^2 \frac{\varphi}{2} - 8b + 4(a + 2b)^2 \leq 1;$$

$$4(a + 2b)^2 \leq 4a \sin^2 \frac{\varphi}{2} + 8b \leq 4a + 8b = 4(a + 2b);$$

$$a + 2b \leq 1;$$

$$\frac{\tau}{h} U + 2\Gamma^x \frac{\tau}{h^2} \leq 1 - \text{условие устойчивости разностной схемы.}$$

Аналогичные условия для остальных координат:

$$\frac{\tau}{h} V + 2\Gamma^y \frac{\tau}{h^2} \leq 1;$$

$$\frac{\tau}{h} W + 2K_z \frac{\tau}{h^2} \leq 1.$$

2.5 Сходимость численного решения

Теорема Лакса. Пусть разностная схема $L_h y^{(h)} = f^{(h)}$ аппроксимирует разностную задачу $Ly = f$ на решении y с порядком h^k и устойчива. Тогда решение $y^{(h)}$ разностной задачи $L_h y^{(h)} = f^{(h)}$ сходится к $[y]_h$.

Отсюда следует, что решение разностной задачи условно сходится к решению дифференциальной, поскольку аппроксимация и условная устойчивость имеют место.

2.6 Точное решение

Точное решение для трехмерной задачи переноса примеси с точечным постоянным источником, находящимся на высоте h над поверхностью земли, имеет вид [3]:

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{4\pi Kx} \exp\left\{\frac{-uy^2}{4Kx}\right\} \left\{ \exp\left[-\frac{u(z-h)^2}{4Kx}\right] + \exp\left[-\frac{u(z+h)^2}{4Kx}\right] \right\},$$

где ось x направлена по направлению ветра;

K – коэффициент диффузии;

u – скорость ветра.

Предполагается, что нижняя граница среды находится на уровне земли. Однако для высотных источников при увеличении расстояния от источника вдоль направления ветра влияние границы будет чувствоваться из-за диффузии дыма к земле. По этой причине решение должно соответствовать безграничной среде при малых x/h , но при больших x/h должно приближаться к решению источника, расположенного на уровне земли. Эта задача решается методом отображения: влияние непроницаемой границы учитывается с помощью рассмотрения не только действительного источника, но и его отражения относительно уровня земли. Тогда искомая концентрация в области представляет собой сумму концентраций от реального и отраженного источника. Последнее слагаемое как раз и описывает отражение факела от земли, соответствующее фиктивному подземному отраженному источнику.

2.7 Программная реализация решения

Задача распространения примеси от постоянного источника заданной высоты в заданном объёме была решена на языке программирования C++, программа построения графиков решения была написана на языке программирования Python.

Параметры решаемой задачи: $\Gamma^x = \Gamma^y = 2 \text{ м}^2/\text{с}$, $K_z = 1 \text{ м}^2/\text{с}$; скорость ветра 2 м/с, ветер юго-западный, мощность источника 1000 кг/с, расположение – в первой координатной плоскости, на высоте, примерно равной половине высоты исследуемого объёма воздуха.

Для использования формулы точного решения были произведены преобразования координат по формулам

$$\begin{cases} x' = x \cos \varphi + y \sin \varphi \\ y' = y \cos \varphi - x \sin \varphi \end{cases}$$

где φ – угол поворота координатной оси.

Смещенность источника относительно начала координат была учтена, поэтому в формуле использовались вместо x и y выражения $x - x_0$ и $y - y_0$, где x_0, y_0 – координаты положения источника.

Результаты для области $[-10,10] \times [-10,10] \times [0,10]$ метров с шагом 1 м по каждой оси, при выбросе, осуществлявшемся в течение 5 секунд с шагом 0.01 с, представлены на рисунках 7-9. Источник расположен в точке $[0.1; 0.1; 5.1]$. Из-за невозможности корректного отображения трехмерных результатов, концентрации в области были осреднены по столбцам на плоскость xOy .

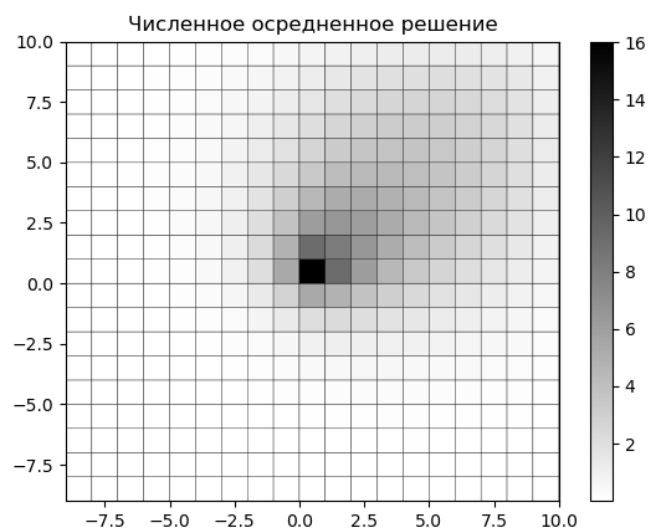


Рисунок 7 – График численного решения задачи

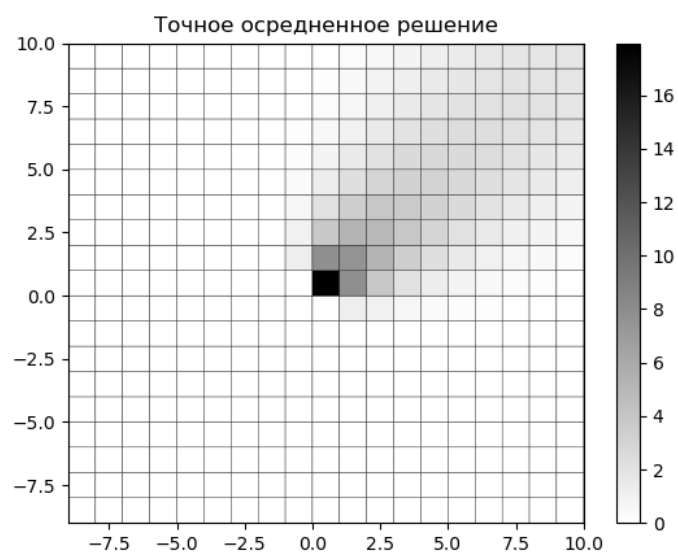


Рисунок 8 – График точного решения задачи

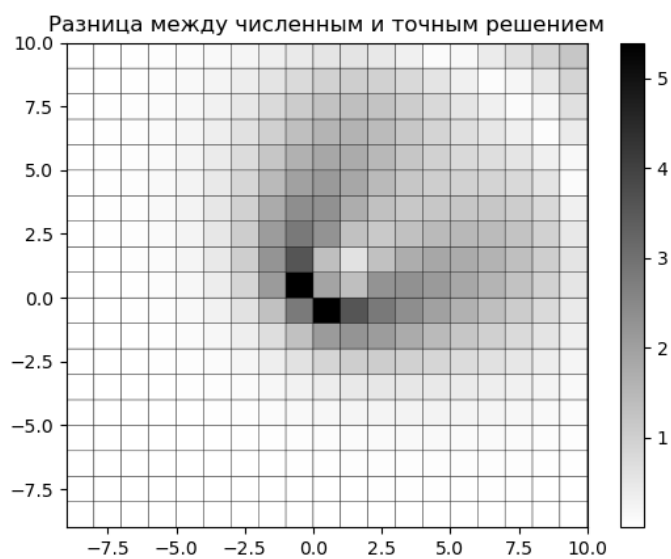


Рисунок 9 – График разности между точным и численным решением задачи

Численное решение достаточно хорошо приближает точное. Наибольшее отклонение наблюдается в областях наименее вероятного рессеивания примеси – с западной стороны источника и южной. В этих частях пространства примесь не наблюдается при точном решении. Численное решение отражает ситуацию, при которой примесь вокруг источника успевает распространиться, прежде чем ее снесет ветром в противоположную сторону. Наименьшее отклонение от точного решения наблюдается в зоне оси факела (области наивысшей концентрации примеси).

Результаты для области $[-10,100] \times [-10,100] \times [0,10]$ метров с шагом 1 м по каждой оси, при выбросе, осуществлявшемся в течение 5 секунд с шагом 0.01 с, представлены на рисунках 10-12. Источник находится в том же положении.

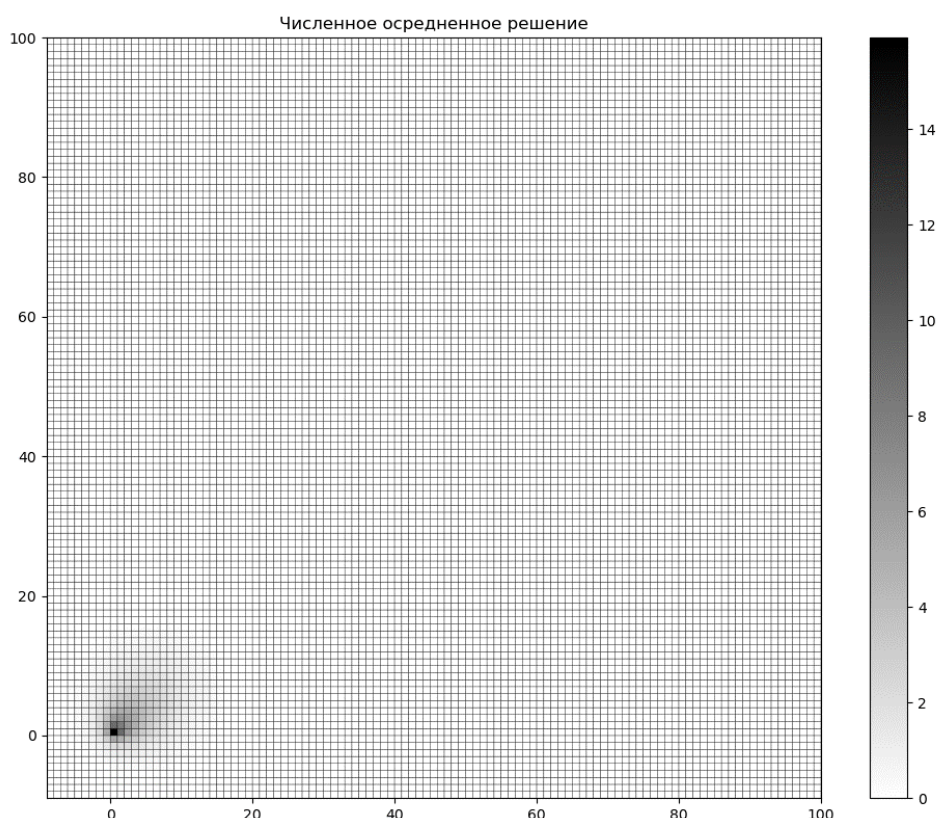


Рисунок 10 – Численное решение задачи

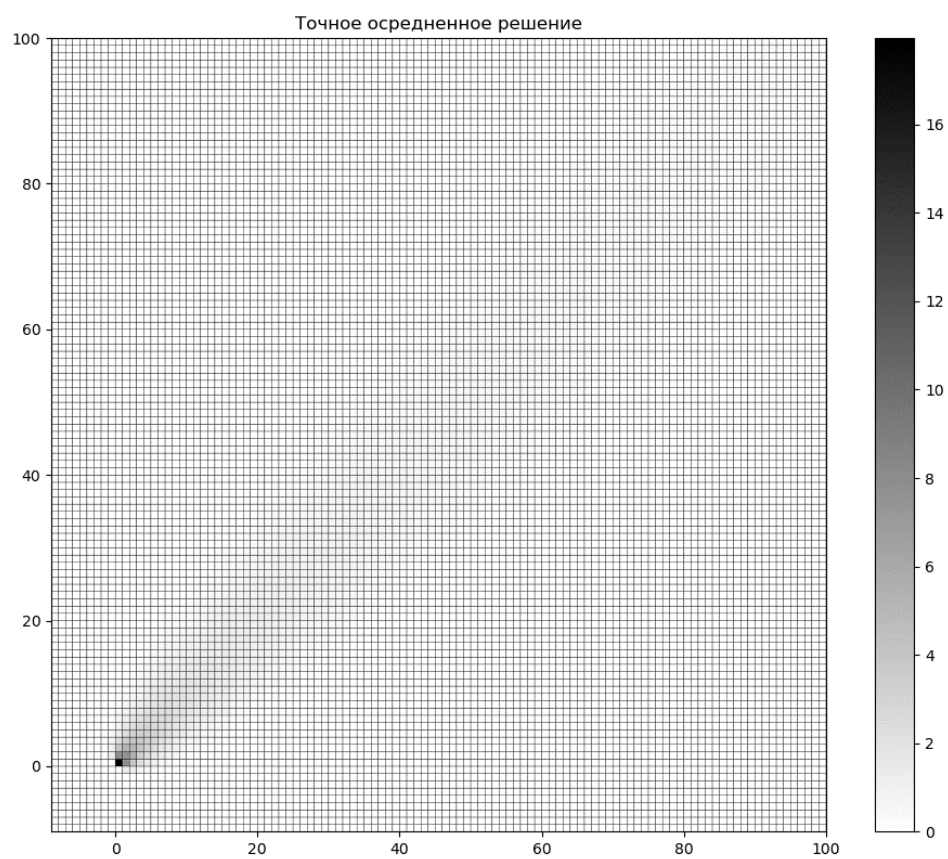


Рисунок 11 – Точное решение задачи

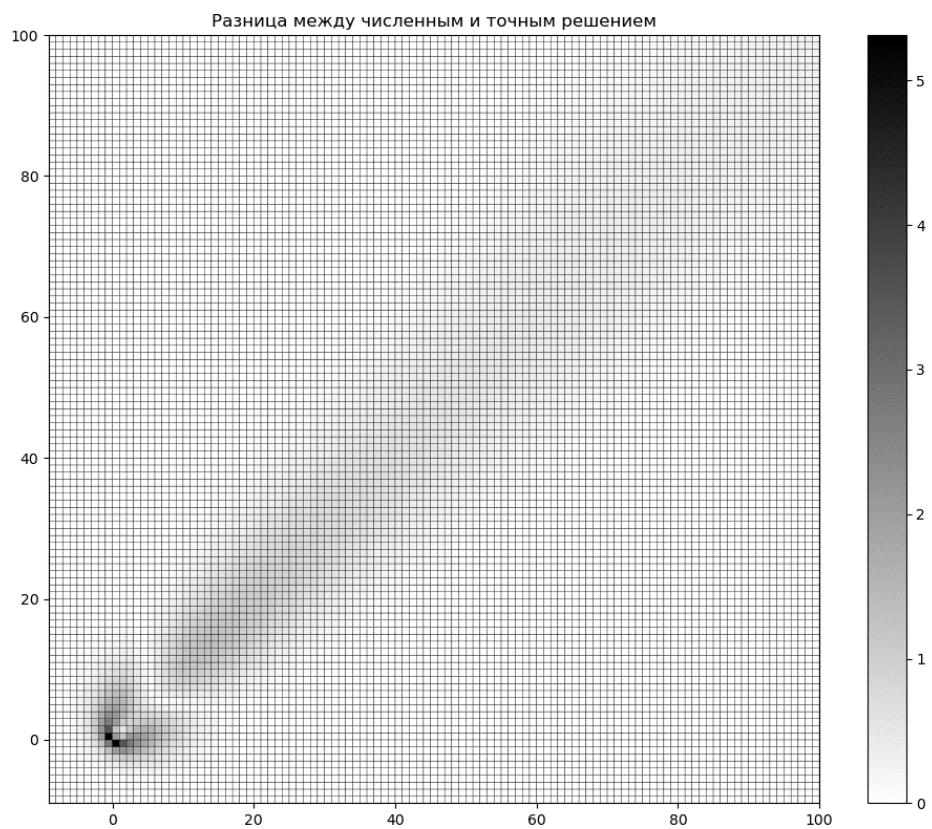


Рисунок 12 – Разница между точным и численным решением задачи

Наибольшее отклонение снова наблюдается в направлениях, противоположных ветру. Численное решение дает больший размах факела, чем есть на самом деле. Наилучшее приближение наблюдается вдоль оси факела. С увеличением расстояния от источника появляется разница между точным и численным решением, поскольку за заданное время частицы примеси, выброшенные в начальный момент расчетов, не успевают долететь до конца области. Это происходит из-за условий задачи, по которым в начальный момент времени в области примеси нет.

Если согласовать время работы программы и размер области так, чтобы при численном решении частицы примеси успели пройти примерно всю область, то разница будет гораздо меньше (рисунок 13-15):

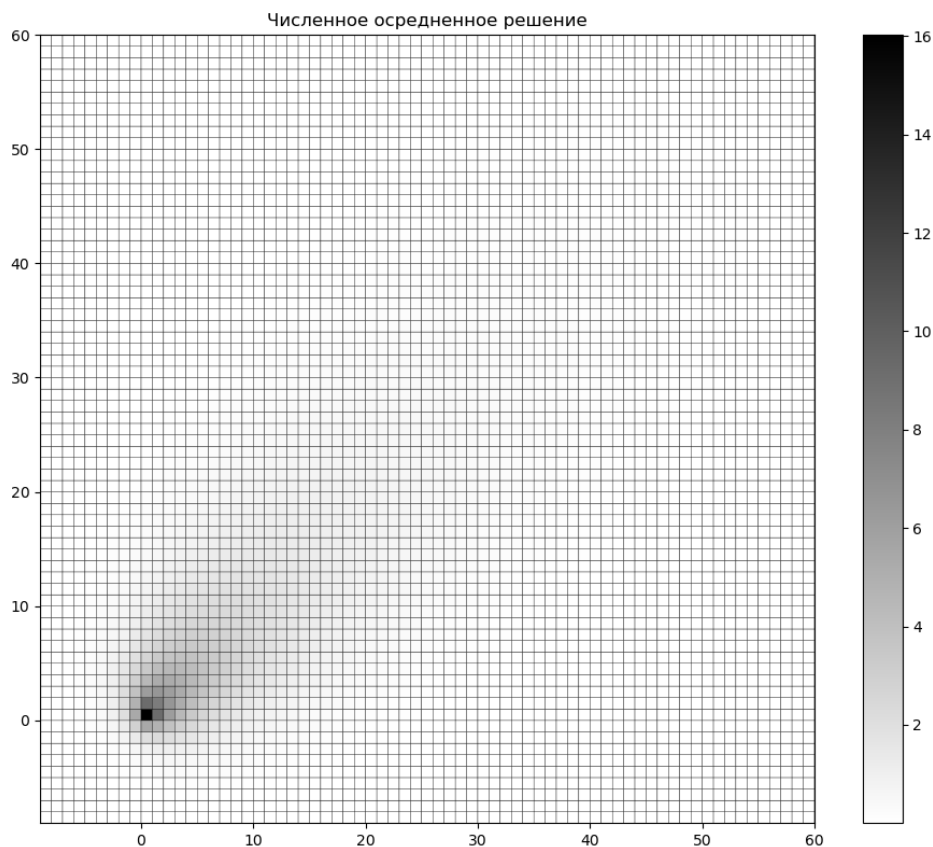


Рисунок 13 – Численное решение задачи

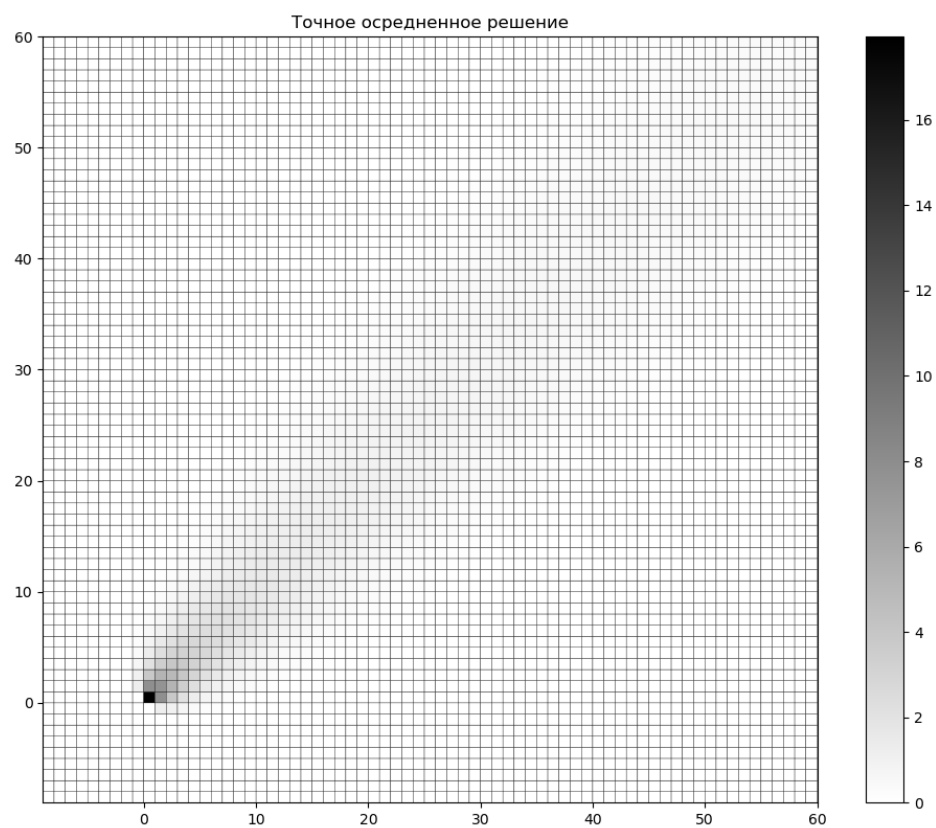


Рисунок 14 – Точное решение задачи

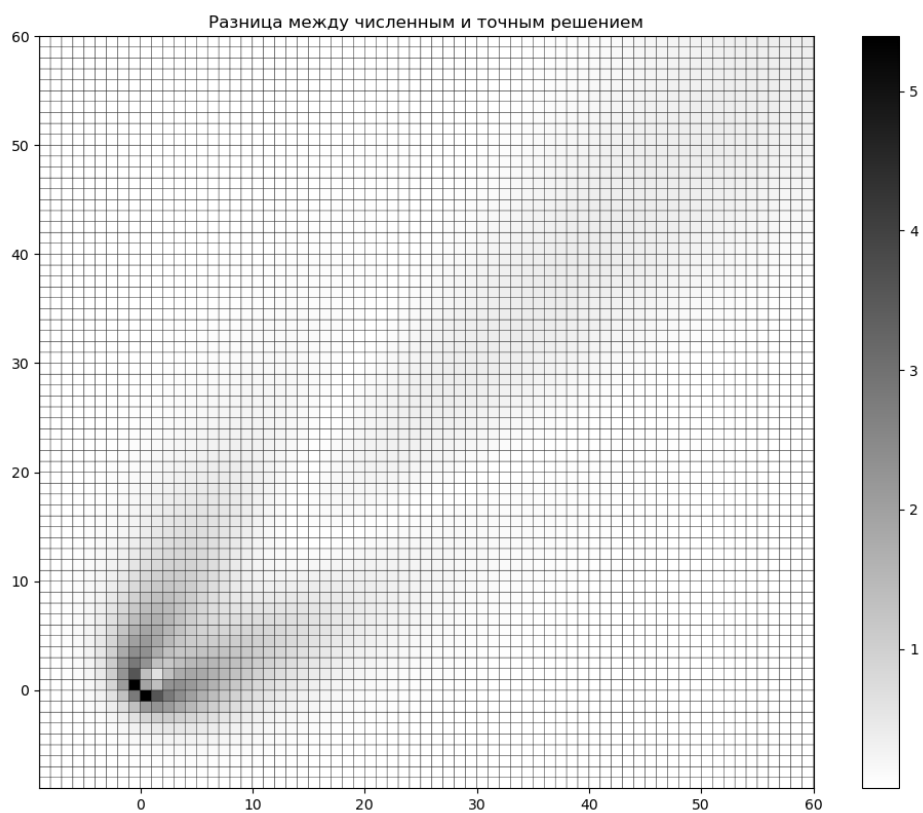


Рисунок 15 – Разница между точным и численным решением задачи

На этих рисунках отличается только время работы программы (50 секунд) и размер области, шаги по времени и пространству, а также прочие параметры остались неизменными. Как видно, в этом случае не наблюдается существенной разницы по мере удаления от источника.

Вывод: полученные результаты удовлетворительны, разница наблюдается из-за первого порядка точности полученной численной схемы.

3 Лагранжев подход распространения примеси

При лагранжевом подходе к решению задачи распространения примеси фокус внимания смещается с области пространства в целом на частицу.

Формула траектории движения имеет вид [8, 9]:

$$X(t + \Delta t) = X(t) + v(X, t)\Delta t.$$

$X(t) = X(x_0, y_0, z_0, t)$ – вектор положения частицы, выпущенной в точке (x_0, y_0, z_0) ;

t – время, Δt – приращение времени;

Вектор ветра имеет вид

$$v = \bar{v} + v' + v_m;$$

$\bar{v}$ – ветер в масштабе сетки;

v' – турбулентные колебания ветра;

v_m – мезомасштабные колебания ветра. Для упрощения принимаются равными нулю.

Турбулентные движения i -й компоненты ветра параметризуются с учетом марковского процесса, основанного на уравнении Ланжевена

$$dv'_i = a_i(x, v', t)dt + b_{ij}(x, v', t)dW_j,$$

где a_i – компонента сдвига и b_{ij} – диффузионный член являются функциями положения, турбулентных пульсаций скорости и времени;

dW_j – добавочный компонент винеровского процесса со средним 0 и дисперсией dt , которые некоррелированы во времени. Перекрестные корреляции между различными компонентами ветра также не принимаются во внимание, поскольку они мало влияют на рассеивание на большие расстояния.

Уравнение для полной скорости частицы в направлении i имеет вид

$$v_i = \bar{v}_i + v'_i$$

Предполагается, что временной масштаб меньше, чем время осреднения, примерно равное одному часу. В этом случае диффузия оценивается следующим образом. Турбулентные пульсации имеют коррелированную и случайную составляющие:

$$v'_i(t + \Delta t) = v'_i(t)\rho_L^i(\Delta t) + \rho_i,$$

где Δt – шаг по времени, $\rho_L^i(\Delta t)$ – лагранжев коэффициент автокорреляции для i -й компоненты скорости и временного шага Δt . Случайная составляющая должна иметь нормальное распределение с нулевым средним и стандартным отклонением

$$\sigma_{\rho_i} = \sigma_i \left(1 - \left(\rho_L^i(\Delta t) \right)^2 \right)^{1/2},$$

где

$$\sigma_i = \left(\overline{v_i'^2} \right)^{1/2}$$

Это условие обеспечивает сохранение энергии турбулентности от шага к шагу.

Часто принимается $\rho_L^i(\Delta t) = \exp(-\Delta t/T_L^i)$.

Предполагается, что движение частицы в каждый момент времени определяется флуктуациями скорости, со значениями σ_i и ρ_L^i в точке нахождения частицы.

Параметры T_L^i зависят от стратификации атмосферы и рассчитываются в соответствии с ней. Характер стратификации задается числом Обухова.

Неустойчивая подразумевает хорошее перемешивание воздуха за счет циркуляции воздушных потоков. Это характерно для дневного времени суток. Число Обухова отрицательно.

Устойчивая подразумевает низкую интенсивность турбулентного движения. Такое характерно для ночного времени. Число Обухова положительно.

Нейтральная, называемая также безразличной, отражает ситуацию отсутствия перемешивания слоев воздуха. Примеси распространяются и вертикально, и горизонтально. Число Обухова равно нулю.

Всюду в этой работе под атмосферой понимается пограничный слой атмосферы.

Неустойчивая атмосфера

Этот вариант стратификации наиболее интересен, поскольку соответствует условиям перемешивания атмосферы, которые характерны для дневного времени суток при нагревании поверхности земли и наличию циркуляции воздуха.

Высота слоя перемешивания h в условиях неустойчивой стратификации является важным масштабным параметром, определяет конвективный масштаб скорости w_* вместе с динамической скоростью u_* и обуховским масштабом длины L . Горизонтальные составляющие энергии турбулентности σ_u и σ_v зависят только от h/L .

Соответствующую аппроксимацию дает аналитическое выражение

$$\sigma_{u,v} \sim u_* \left(12 + \frac{h}{2|L|} \right)^{\frac{1}{3}}$$

Выражения для определения энергии турбулентности вертикальной составляющей σ_w имеют вид:

$$\frac{\sigma_w}{w_*} = 0.96 \left(\frac{3z-L}{h} \right)^{1/3} \text{ при } \frac{z}{h} < 0.03,$$

$$\frac{\sigma_w}{w_*} = \min \left\{ 0.96 \left(\frac{3z-L}{h} \right)^{1/3}; 0.763 \left(\frac{z}{h} \right)^{0.175} \right\} \text{ при } 0.03 < \frac{z}{h} < 0.4,$$

$$\frac{\sigma_w}{w_*} = 0.722 \left(1 - \frac{z}{h} \right)^{0.207} \text{ при } 0.4 < \frac{z}{h} < 0.96,$$

$$\frac{\sigma_w}{w_*} = 0.37 \text{ при } 0.96 < \frac{z}{h} < 1.$$

Выражения для лагранжевых временных масштабов

$$T_L^u = T_L^v = 0.15 \frac{h}{\sigma_u},$$

$$T_L^w = 0.1 \frac{z}{\sigma_w} \frac{1}{[0.55 + 0.38(z-z_0)/L]} \text{ при } \frac{z}{h} < 0.1; -\frac{(z-z_0)}{L} < 1,$$

$$T_L^w = 0.59 \frac{z}{\sigma_w} \text{ при } \frac{z}{h} < 0.1; -\frac{(z-z_0)}{L} > 1,$$

$$T_L^w = 0.15 \frac{h}{\sigma_w} \left\{ 1 - \exp \left(-\frac{5z}{h} \right) \right\} \text{ при } \frac{z}{h} > 0.1.$$

Устойчивая атмосфера

При устойчивой стратификации к поверхности земли примыкает слой динамической турбулентности. Высота h , на которой турбулентность затухает до нуля, может иметь значение нескольких метров, а может – нескольких сотен метров. Выражение для её вычисления:

$$h = c(u_* L/f)^{1/2},$$

где f – параметр Кориолиса, $c \approx 0.25$.

Аппроксимация вертикальных профилей энергии турбулентности:

$$\frac{\sigma_w}{u_*} = \frac{\sigma_v}{u_*} = 1.3(1 - z/h),$$

$$\frac{\sigma_u}{u_*} = 2(1 - z/h).$$

Лагранжевы временные масштабы:

$$T_L^u = 0.15 \frac{h}{\sigma_u} \left(\frac{z}{h}\right)^{0.5},$$

$$T_L^v = 0.07 \frac{h}{\sigma_v} \left(\frac{z}{h}\right)^{0.5},$$

$$T_L^w = 0.1 \frac{h}{\sigma_w} \left(\frac{z}{h}\right)^{0.8}.$$

Нейтральная атмосфера

Энергия турбулентности в безразлично стратифицированной атмосфере монотонно убывает с высотой. Рабочие формулы:

$$\frac{\sigma_u}{u_*} = 2 \exp\left(-\frac{3fz}{u_*}\right),$$

$$\frac{\sigma_v}{u_*} = \frac{\sigma_w}{u_*} = 1.3 \exp\left(-\frac{2fz}{u_*}\right).$$

Для всех трех составляющих пульсаций скорости ветра может использоваться одна и та же формула:

$$T_L = \frac{0.5z/\sigma_w}{1+15fz/u_*}.$$

После нахождения выражения для вектора ветра можно получить выражение для траектории и понять, куда отправилась частица.

3.1 Постановка задачи

Физическая

Постановка совпадает с той, что представлена в главе эйлера подхода: по заданным параметрам положения в пространстве и интенсивности источника требуется найти концентрацию распространившейся из него примеси.

Рассчитывается траектория движения частицы. Начальное её положение совпадает с положением источника. Источник располагается внутри некоторого объема пространства $[0, Lx][0, Ly][0, Lz]$. По траектории вычисляется концентрация примеси на пути движения.

Математическая

Рассчитывается траектория движения частицы

$$X(t + \Delta t) = X(t) + v(X, t)\Delta t.$$

Начальное условие $X(0) = (x_0, y_0, z_0)$,

где (x_0, y_0, z_0) – положение источника.

Каждая частица несет в себе $\frac{Q}{Np}$ кг примеси, где Np – количество запускаемых частиц.

3.2 Численная схема решения задачи

Сеточная область задается аналогично подходу Эйлера.

В начальный момент времени частица находится в точке $(x_0 y_0 z_0)$.

Задается некоторый шаг по времени τ , через который мы определяем положение частицы в пространстве. Положение – это ячейка пространства, в которой находится частица. Если частица попала в ячейку, мы добавляем к предыдущему значению концентрации в этой ячейке то, которое принесла частица, но при этом умножаем его на время, проведенное в ячейке τ . Это обеспечивает согласование единиц измерения: в заданном объеме получается концентрация:

$$C = \frac{Q}{Np} \tau \frac{1}{M} \Leftrightarrow \left[\frac{\text{кг}}{\text{м}^3} \right] = \left[\frac{\text{кг}}{\text{с}} \text{с} \frac{1}{\text{м}^3} \right]$$

3.3 Точное решение

В качестве точного решения возьмем гауссову модель факела, используемую в большинстве практических приложений диффузии [8]:

$$C = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp \left\{ -\frac{y^2}{2\sigma_y^2} \right\} \left[\exp \left\{ -\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2} \right\} + \exp \left\{ -\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2} \right\} \right],$$

где

$[C] = \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ – концентрация примеси. C зависит от x, y, z, t ;

$[Q] = \frac{\text{кг}}{\text{с}}$ – мощность непрерывного точечного источника;

u – скорость ветра;

H – эффективная высота источника;

y – расстояние в поперечном направлении от оси факела (линии наибольшей концентрации примеси);

z – высота над уровнем земли;

σ_y, σ_z – эмпирические диффузионные параметры, зависящие от атмосферной устойчивости и расстояния до источника.

Определим далее высоту верхней границы пограничного слоя, равную 100 м.

Расчетные формулы для диффузионных параметров имеют вид:

- для $H > 0.1h$
 - $\sigma_y = \frac{h}{3}X, X < 1$;
 - $\sigma_y = \frac{h}{3}X^{2/3}, 1 < X < 3$;
 - ✓ $\sigma_z = \frac{h}{2}X, X < \frac{2}{3}$;
 - ✓ $\sigma_z = \frac{h}{3}, \frac{2}{3} < X$;
- для $H < 0.1h$
 - $\sigma_y = \frac{3h}{5}X, X < \frac{1}{6}$;
 - $\sigma_y = \frac{h}{3}X^{2/3}, \frac{1}{6} < X < 3$;

$$\checkmark \sigma_z = \frac{h}{2} X^{6/5}, X < \frac{6}{5};$$

$$\checkmark \sigma_z = \frac{3h}{5}, \frac{6}{5} < X.$$

$X = \frac{xw_*}{hu}$, x – расстояние, которое проходит частица от источника до рассматриваемой точки со скоростью u ;

$w_* = \left(\frac{hu_*}{-\kappa L} \right)^{1/3}$ – конвективный масштаб скорости;

$\kappa \approx 0.4$ – постоянная Кармана;

L – масштаб Обухова;

u_* – динамическая скорость (скорость трения).

$L > 0$ при устойчивой стратификации атмосферы;

$L = 0$ при нейтральной;

$L < 0$ при неустойчивой стратификации.

Можно определять масштаб Обухова как $L = 1100u_*^2$.

u_* определяется экспериментально, однако для общего руководства в литературе [3] можно найти некоторые значения для различных высот шероховатости поверхности.

3.4 Программная реализация решения

Для области 2000х2000х500 метров решим задачу численно и точно. Источник находится в точке $[0,0,20]$. Получены графики (рисунок 16-18):

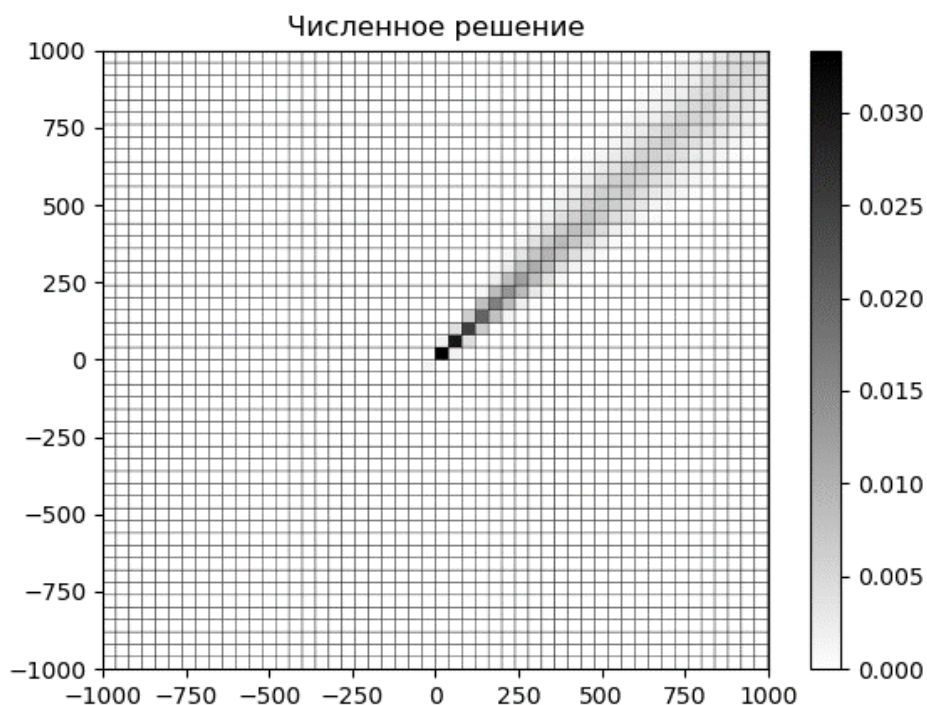


Рисунок 16 – Численное решение

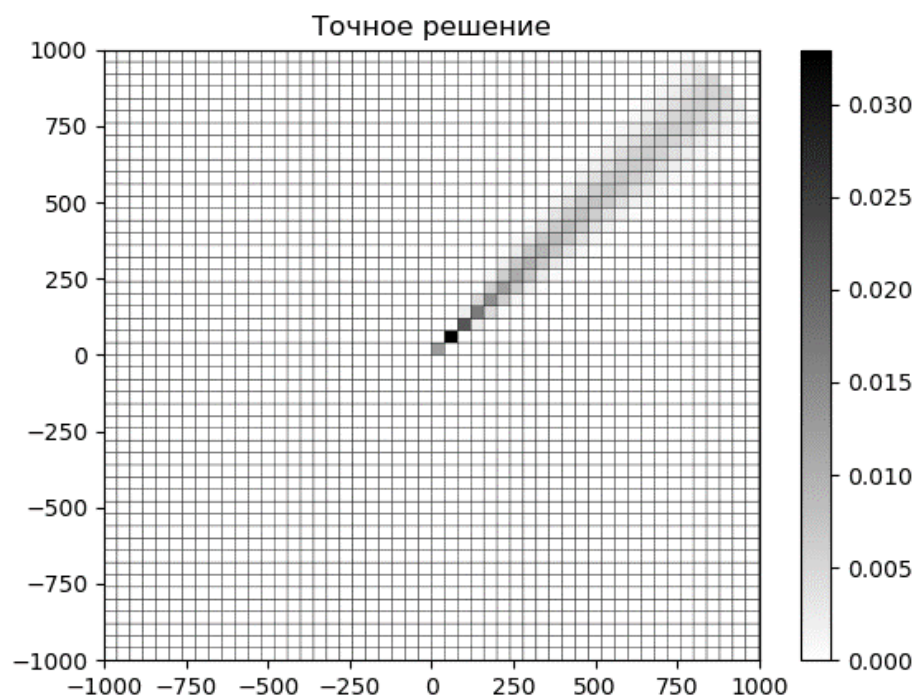


Рисунок 17 – Точное решение задачи

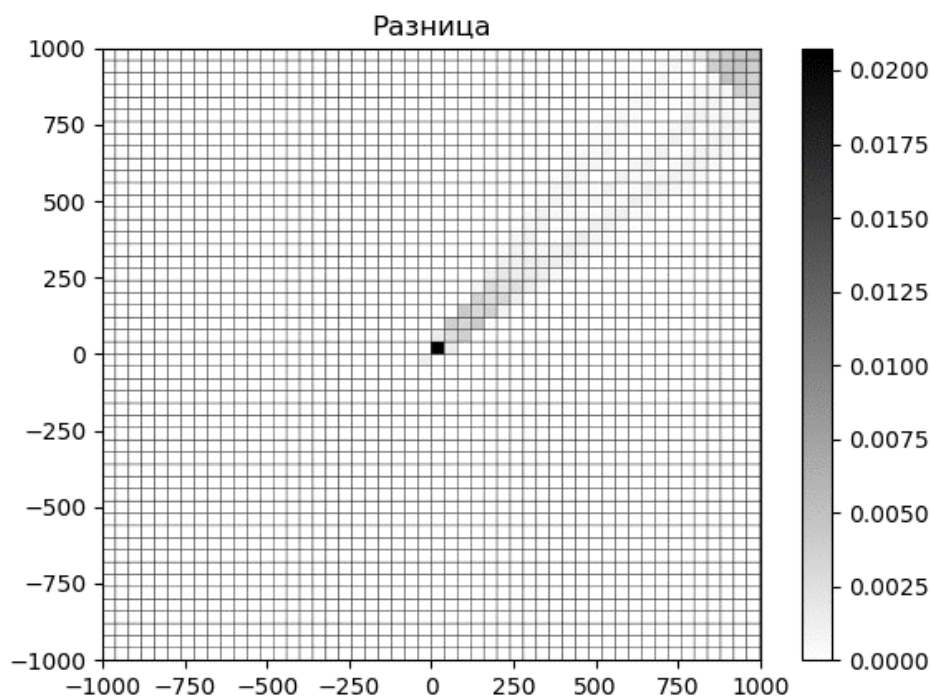


Рисунок 18 – Разница между точным и численным решением

Наибольшая разница обнаруживается в квадрате источника. Это вызвано тем, что математически в зоне источника по формуле точного решения должно получаться бесконечное значение концентрации, поскольку в этом случае σ_y, σ_z обращаются в нуль. Однако, физически значение в этой точке не может быть равно бесконечности, и разделить на нуль нельзя. Поэтому для куба, содержащего источник, значение концентрации вычисляется по тем же формулам, что и для остальных, с тем условием, что ни один элемент формулы точного решения (σ_y, σ_z , разность координат, расстояние до точки измерения) не обращается в нуль. Это можно сделать, если не допускать попадания точки источника точно в середину единичного объема.

Во всех остальных точках плоскости численное решение достаточно хорошо приближает точное.

Увеличение и уменьшение шага не портит картину (рисунок 19-24):

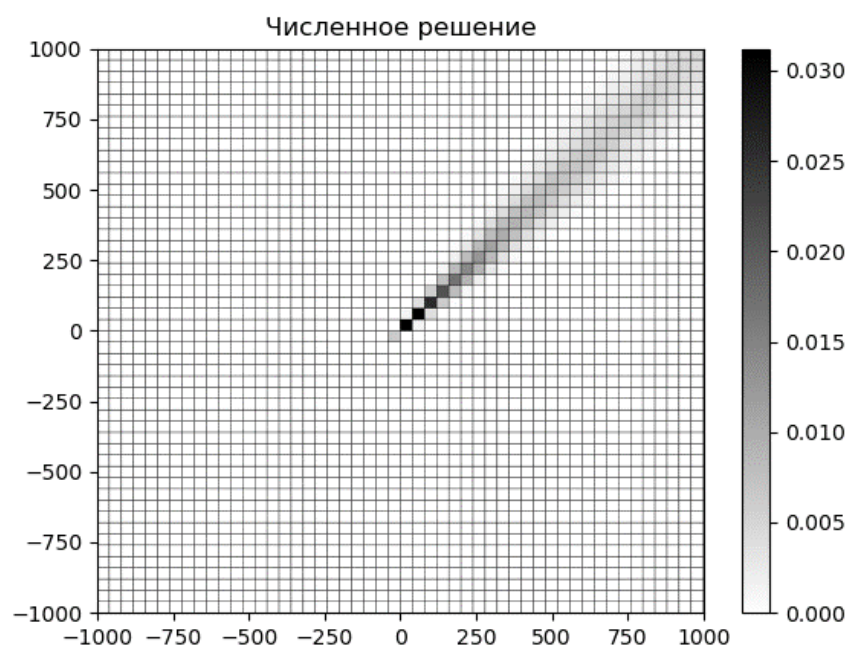


Рисунок 19 – Численное решение для шага 5 секунд

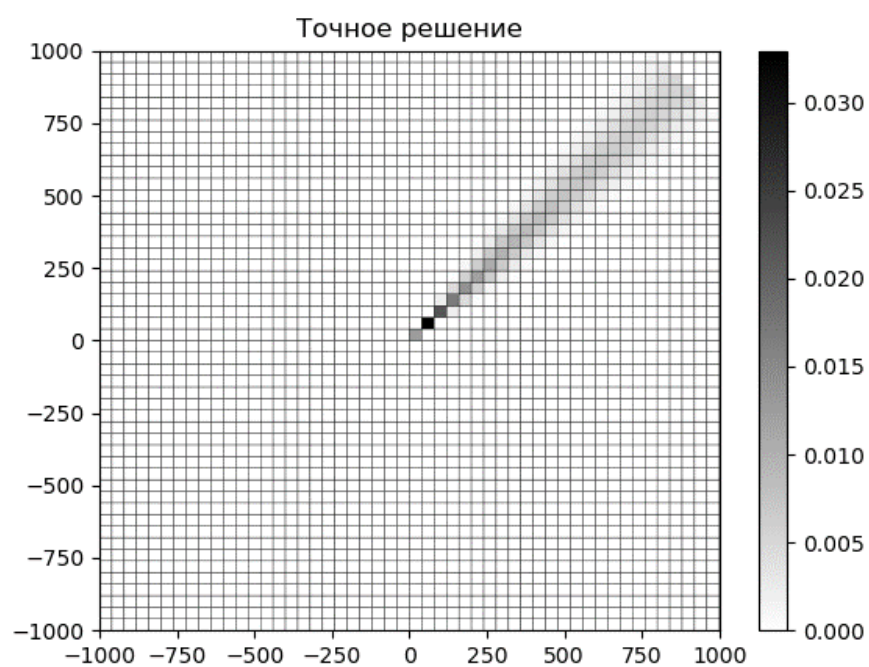


Рисунок 20 – Точное решение для временного шага 5 секунд

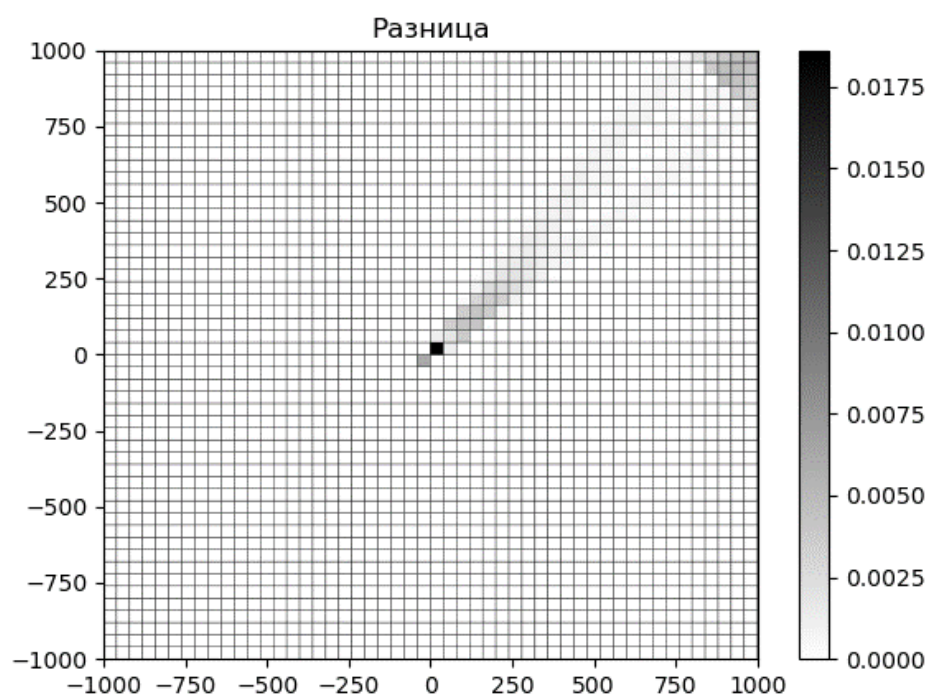


Рисунок 21 – Разница между точным и численным решением

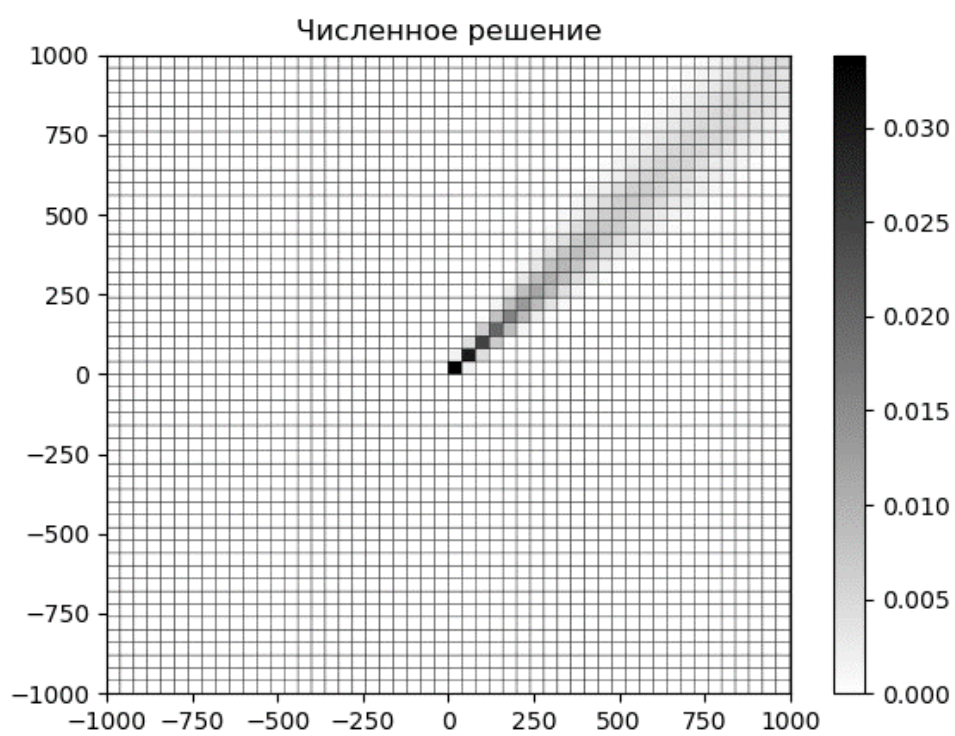


Рисунок 22 – Численное решение для шага 0,1 секунд

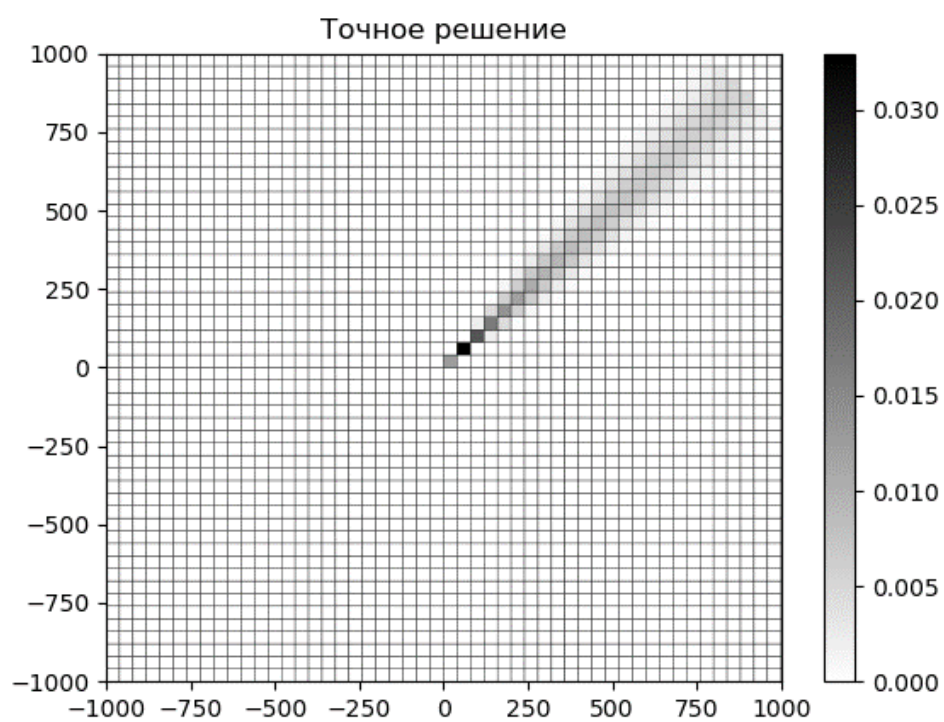


Рисунок 23 – Точное решение для шага 0,1 секунд

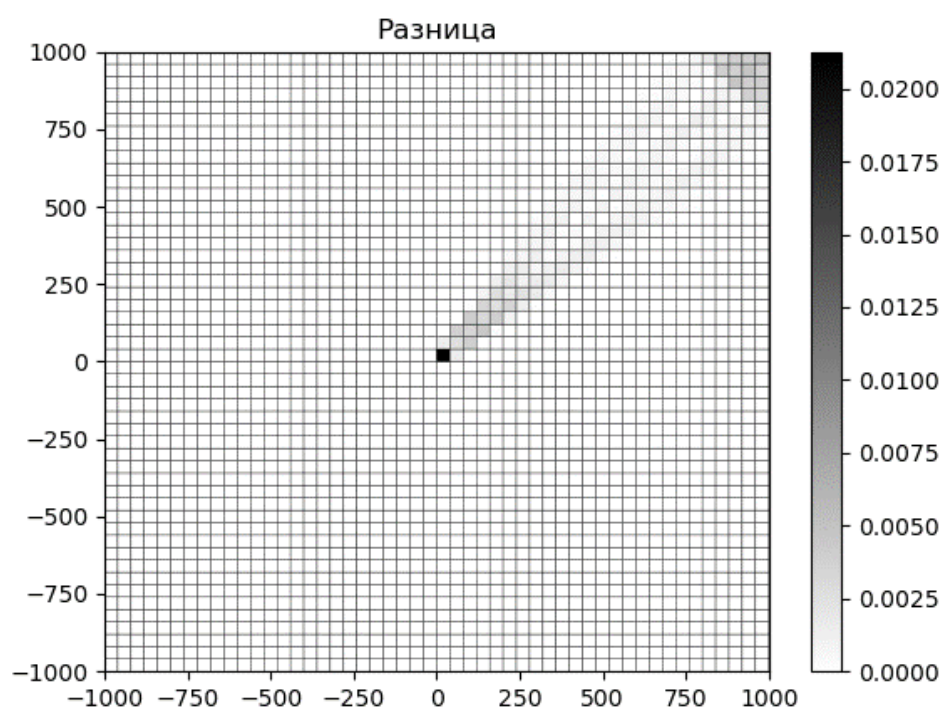


Рисунок 24 – Разница между точным и численным решением

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрен подход Эйлера моделирования распространения примеси. Численно решено уравнение переноса, учитывающее ветер, диффузию и интенсивность источника. Нестационарный член аппроксимирован по формуле конечных разностей, адвективные члены – с помощью противопотоковой схемы UPWIND, диффузионные члены по формуле центральных разностей. Кроме этого, использованы формулы левых и средних прямоугольников. Получен первый порядок аппроксимации численной схемы по времени и пространству. Выведено условие подавления схемной вязкости. Определены условия устойчивости разностной схемы. По теореме Лакса из аппроксимации и устойчивости следует сходимость разностного решения задачи к дифференциальному.

Проведен сравнительный анализ численного решения и точного, показавший, что результаты численного решения достаточно близки к результатам точного. Представлены сравнительные графики.

Рассмотрен подход Лагранжа моделирования распространения примеси, приведены расчетные формулы. Численно решено уравнение траектории для каждой частицы, получена концентрация в заданном объеме воздуха.

Проведенный сравнительный анализ полученного численного решения и точного позволяет сделать вывод о достаточной близости результатов. Существенная разница в решении наблюдается только в зоне источника, математические объяснения этому явлению даны в тексте. Графики представлены.

Таким образом, в работе двумя методами решена трехмерная задача распространения примеси, получены численные результаты, представленные на графиках. Полученные для решения программы на языке программирования C++ могут быть применены (с соответствующими модификациями) для дальнейшего решения усложненных версий задач и

распараллеливания с целью решения на многопроцессорных вычислительных комплексах.

Практическая значимость проделанной работы заключается в возможности применения моделей для моделирования распространения примеси.

Личный вклад автора работы. Представленные результаты получены лично автором работы, помощь в изучении подходов оказывалась научным руководителем Шельминой Еленой Александровной и заведующим кафедрой вычислительной математики и компьютерного моделирования ММФ ТГУ Старченко Александром Васильевичем.

Результаты работы докладывались и обсуждались на всероссийской молодежной научной конференции «Все грани математики и механики».

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ И ИСТОЧНИКОВ

- [1] Основные показатели охраны окружающей среды / РОССТАТ. – Москва, 2021. – 109 с.
- [2] Хромов С. П. Метеорология и климатология / С. П. Хромов, М. А. Петросянц. – М. : Наука, 2006. – 582 с.
- [3] Сеттон О. Г. Микрометеорология / О. Г. Сеттон. – Ленинград : Гидромет. изд., 1958. – 355 с.
- [4] Патанкар С. В. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости / С. Патанкар; Пер. с англ. под ред. В. Д. Виленского. - М. : Энергоатомиздат, 1984. – 149 с.
- [5] Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды / Г.И. Марчук. – М. : Наука, 1982. – 315 с.
- [6] Меркулова Н.Н., Михайлов М.Д. Методы приближенных вычислений : учебное пособие. –2-е изд., перераб. и доп. / под ред. А.В. Старченко. –Томск : Издательский Дом ТГУ, 2014. – 764 с.
- [7] Меркулова Н.Н., Михайлов М.Д. Разностные схемы для обыкновенных дифференциальных уравнений. Учебное пособие. – Томск : изд. ТГУ, 2014. – 122 с.
- [8] Атмосферная турбулентность и моделирование распространения примесей / под ред. Ф.Т.М. Ньистадта, Х. Ван Допа. – Л. : Гидрометеиздат, 1985. – 350 с.
- [9] Stohl A. The FLEXPART particle dispersion model / A. Stohl, P. Siebert, 2022. – 73 p.
- [10] Осипцов А. Н. Лагранжев подход в механике дисперсных сред: преимущества и перспективы // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. – 2011. – № 4 (3). – С. 1024–1026.
- [11] Семенова А.А. Разностная схема для нестационарного уравнения переноса, построенная с использованием локальных весов интерполяционных

кубических сплайнов / А.А. Семенова, А.А. Старченко // Вестник томского государственного университета. – 2017. – №49. – С. 61-74.

[12] Миньков Л.Л. Основные подходы к численному решению одномерных уравнений газовой динамики : учеб. пособие / Л.Л. Миньков, Э.Р. Шрагер. – Томск, 2016. – 136 с.

[13] Панасенко Е. А. Численное решение некоторых обратных задач с различными типами источников атмосферного загрязнения / Е.А. Панасенко, А.В. Старченко // Вестник томского государственного университета, – 2008. – №2 (3) – С. 47-55.

[14] Алоян А.Е. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды / А.Е. Алоян, В.В. Пененко, В.В. Козодеров // Современные проблемы вычислительной математики и математического моделирования. Т.2 Математическое моделирование. – М. : Наука, 2005. – С. 277 – 349.

[15] Бахвалов Н.С. Численные методы / Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельков. – М. : Бином, 2004. – 636 с.

[16] Беликов Д.А. Применение модели турбулентного переноса примеси к исследованию образования вторичных загрязнителей в атмосфере города / Д.А. Беликов, А.В. Старченко // Измерения, моделирование и информационные системы для изучения окружающей среды: сб. науч. трудов. / под ред. Е.П. Гордова. – Томск : Изд – во Томского ЦНТИ, 2006. – С. 154.

[17] Белов И.А. Модели турбулентности: учебное пособие / И.А. Белов. – Л. : ЛМИ, 1986. – 100 с.

[18] Белов И.А. Моделирование гидромеханических процессов в технологии изготовления полупроводниковых приборов и микросхем / И.А. Белов, В.А. Шеленкевич, Л.И. Шуб. – Л. : Политехника, 1991. – 287 с.

[19] Берлянд М.Е. О расчете загрязнений атмосферы выбросами их дымовых труб электростанций / М.Е. Берлянд, Е.Л. Генихович, Р.И. Оникул // Труды Геолого – географического общества. – 1964. – вып. 158. – С. 3 – 21.

[20] Вержбицкий В.М. Основы численных методов / В.М. Вержбицкий. – М. : Высшая школа, 2002. – 847 с.

- [21] Годунов С.К. Разностные схемы / С.К. Годунов, В.С. Рябенский. – М. : Наука, 1977. – 439 с.
- [22] Калиткин Н.Н. Численные методы / Н.Н. Калиткин. – М. : Наука, 1978. – 512 с.
- [23] Карманов В.Г. Математическое программирование / В.Г. Карманов. – М. : Наука, 2004. – 263 с.
- [24] Курбацкий А.Ф. Введение в моделирование турбулентного переноса импульса и скаляра / А.Ф. Курбацкий. – Новосибирск : Академическое изд-во «ГЕО», 2007. – 331 с.
- [25] Лебедев А.С. Практикум по численному решению уравнений в частных производных / А.С. Лебедев, С.Г. Черный. – Новосибирск: Изд – во Новосибирского университета, 2000. – 136 с.
- [26] Марчук Г.И. Глобальный перенос примеси в атмосфере / Г.И. Марчук, А.Е. Алоян // Физика атмосферы и океана. – 1995. – Т. 31, № 5. – С. 29 – 42.
- [27] Панасенко Е.А. Определение городских районов – загрязнителей атмосферного воздуха по данным наблюдений / Е.А. Панасенко, А.В. Старченко // Оптика атмосферы и океана. – 2009. – Т.22, № 03. – с. 279 – 283.

Введите текст:

...или загрузите файл:

Файл не выбран...

Выбрать файл...

Укажите год публикации: 2022 ▼

Выберите коллекции

Все

Рефераты

Авторефераты

Иностранные конференции

PubMed

Википедия

Российские конференции

Иностранные журналы

Российские журналы

Энциклопедии

Англоязычная википедия

Анализировать

Проверить по расширенному списку коллекций системы Руконтекст (<http://text.rucont.ru/like>)

Обработан файл:
ВКР.pdf.

Год публикации: 2022.

Оценка оригинальности документа - 100.0%

Процент условно корректных заимствований - 0.0%

Процент некорректных заимствований - 0.0%

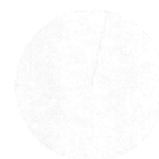
Время выполнения: 17 с.

Заимствования отсутствуют

[Значимые оригинальные фрагменты](#)

[Библиографические ссылки](#)

[Искать в Интернете](#)



100.00%

[Дополнительно](#)

Научный руководитель
доцент каф. ВМК МГУ

Иван / Минькина Е.А.