UDC 519.5, 519.6

Building a Computational Algorithm to Model Pollutant Transport in the Turbulent Atmosphere on the Basis of Unsteady Three-Dimensional Equation

Elena P. Yartseva

North - Caucasus Federal University
355000, Russia, Stavropol, st. Pushkin 1
Competitor of the Department of Mathematical Analysis
E-mail: yartseva_elena@mail.ru

Abstract. The article discusses the construction of a computational algorithm to model pollutant transport in the turbulent atmosphere on the basis of unsteady three-dimensional equation.
Keywords: mathematical models of the theory of carrying over; computing algorithm; numerical researches.

Введение. Целью работы является построение на основе методов расщепления моделей и эффективных алгоритмов для задач переноса загрязнений в турбулентной атмосфере, использующих оперативную информацию метеорологического характера. Математическая модель явления диффузного переноса загрязнений в пределах пограничного слоя атмосферы представлена нестационарным трехмерным линейным уравнением параболического типа – уравнением переноса. Вычислительная схема решения трехмерных задач основана на методах покоординатного расщепления и включением в нее метода интегральных уравнений (первая итерационная схема), что позволяет сложные многомерные задачи сводить к последовательности взаимосвязанных более простых одномерных подзадач, тем самым существенно снизить сложность алгоритмов и применять технологию параллельных вычислений для их реализации на ЭВМ.

Уравнение переноса примесей, распространяющихся в пограничном слое атмосферы, для случая трех пространственных переменных, с учетом условия неразрывности, имеет вид [1]:

$$\frac{\partial q(P,t)}{\partial t}+\alpha(t)q(P,t)+V_x(P,t)\cdot\frac{\partial q(P,t)}{\partial x}-\frac{\partial}{\partial x}\left(K_x(P,t)\cdot\frac{\partial q(P,t)}{\partial x}\right)+$$
$$+V_y(P,t)\cdot\frac{\partial q(P,t)}{\partial y}-\frac{\partial}{\partial y}\left(K_y(P,t)\cdot\frac{\partial q(P,t)}{\partial y}\right)+$$
$$+V_z(P,t)\cdot\frac{\partial q(P,t)}{\partial z}-\frac{\partial}{\partial z}\left(K_z(P,t)\cdot\frac{\partial q(P,t)}{\partial z}\right)=S(P,t), \qquad (1)$$

в котором $P=P(x,y,z)$, $P\in\Omega\subset R_3$, $t\in[0,T]$, начальные условия $q(P,t)|_{t=0}=q(P,0)=q_0(P)$ для $P\in\Omega$, граничные условия $q(P,t)=\overline{q}(P,t)$ для $P\in\overline{\Omega}$, где $q(P,0)=q_0(P)$ и $\overline{q}(P,t)$ - заданные функции, а $\overline{\Omega}$ - граница области Ω. В уравнении (1) $q(P,t)$ - концентрация примесей, имеющихся в точке пространства P в момент времени t; $\alpha(t)$ - коэффициент, характеризующий степень вывода или привнесения примесей в данный объем за счет химических или других процессов, протекающих в приземном слое атмосферы; $V_x(P,t)$, $V_y(P,t)$, $V_z(P,t)$ - компоненты вектора скорости ветра; $K_x(P,t)$, $K_y(P,t)$, $K_z(P,t)$ - турбулентность, характеризуемая коэффициентом турбулентной диффузии, $S(P,t)$ - источник примесей. Уравнение (1) решается относительно распределения $q(P,t)$, остальные функции являются исходными измерительными данными. В соответствии с методом расщепления [1], нестационарную модель (1) с начальными и граничными условиями можно представить в виде трех последовательно решаемых во времени подзадач, соответствующих переносу субстанции вдоль координатных осей $\overrightarrow{Ox}$, $\overrightarrow{Oy}$, $\overrightarrow{Oz}$ соответственно, в пределах элементарного временного интервала $\lfloor t_j, t_{j+1} \rfloor$:

$$\frac{\partial q_1}{\partial t} + \alpha q_1 + V_z \cdot \frac{\partial q_1}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z}\left(K_z \cdot \frac{\partial q_1}{\partial z} \right) = \omega_1 \cdot S(P_1, t), \tag{2}$$

$$\frac{\partial q_2}{\partial t} + V_x \cdot \frac{\partial q_2}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}\left(K_x \cdot \frac{\partial q_2}{\partial x} \right) = \omega_2 \cdot S(P_2, t), \tag{3}$$

$$\frac{\partial q_3}{\partial t} + V_y \cdot \frac{\partial q_3}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y}\left(K_y \cdot \frac{\partial q_3}{\partial y} \right) = S_3(P_3, t). \tag{4}$$

Уравнения (2) – (4) однотипны и поэтому соответствующие алгоритмические процедуры аналогичны друг другу (но не одинаковы полностью), что упрощает вычислительную модель в целом. Рассмотрим схему покоординатного расщепления задачи (2) – (4), где каждое из уравнений с соответствующими начальными и граничными условиями решается методом интегральных уравнений и используя при этом ту итерационную схему, которая строится для уравнения переноса путем предварительного его интегрирования по временной переменной t. Таким образом, на первом этапе задачи речь идет об определении функции $q(t|x, y, z)$. Определение исходных данных для уравнения переноса (1) с начальными и граничными условиями показывает, что все они имеют сильный разброс в масштабах единиц измерения. Для приведения исходных величин к единому масштабу применяется процедура перемасштабирования или построения параметризованной вычислительной модели [2], включающая в себя следующие этапы: 1) нормирование переменных; 2) нормирование функций исходных данных; 3) нормирование начальных и граничных условий; 4) вычисление нормировочных коэффициентов. Выполняя соответствующие преобразования уравнений (2) – (4), получим для каждого из них интегральное уравнение Вольтерра второго рода, численное решение которого можно выполнить методом последовательных приближений. С учетом нормирования переменных и функций, уравнения (2) - (4) получат представление:

Задача I:
$$\frac{\partial \hat{q}_1}{\partial \hat{t}} + \hat{\alpha}\hat{q}_1 + \beta_z \cdot \hat{V}_z \cdot \frac{\partial \hat{q}_1}{\partial \hat{z}} - \theta_z \frac{\partial}{\partial \hat{z}}\left(\hat{K}_z \cdot \frac{\partial \hat{q}_1}{\partial \hat{z}} \right) = \xi_1 \cdot \hat{S}_1(\hat{P}_1, \hat{t}),$$

$$\hat{q}_1(\hat{P}_1, 0) = \hat{q}_0(\hat{P}_1), \text{ если } \hat{t} = 0, \; \hat{q}_1(\hat{P}, \hat{t}_j) = \hat{q}_3(\hat{P}, \hat{t}_{j+1}), \text{ если } \hat{t} > 0,$$

$$\hat{q}_1(\hat{P}_4, \hat{t}) = \hat{\bar{q}}_4(\hat{P}_4, \hat{t}), \; \hat{q}_1(\hat{P}_5, \hat{t}) = \hat{\bar{q}}_5(\hat{P}_5, \hat{t}); \tag{5}$$

Задача II:
$$\frac{\partial \hat{q}_2}{\partial \hat{t}} + \beta_x \cdot \hat{V}_x \cdot \frac{\partial \hat{q}_2}{\partial \hat{x}} - \theta_x \cdot \frac{\partial}{\partial \hat{x}}\left(\hat{K}_x \cdot \frac{\partial \hat{q}_2}{\partial \hat{x}} \right) = \xi_2 \cdot \hat{S}_2(\hat{P}_2, \hat{t}),$$

$$\hat{q}_2(\hat{P}, \hat{t}_j) = \hat{q}_1(\hat{P}, \hat{t}_{j+1}),$$

$$\hat{q}_2(\hat{P}_6, \hat{t}) = \hat{\bar{q}}_6(\hat{P}_6, \hat{t}), \; \hat{q}_2(\hat{P}_7, \hat{t}) = \hat{\bar{q}}_6(\hat{P}_7, \hat{t}); \tag{6}$$

Задача III:
$$\frac{\partial \hat{q}_3}{\partial \hat{t}} + \beta_y \cdot \hat{V}_y \cdot \frac{\partial \hat{q}_3}{\partial \hat{y}} - \theta_y \cdot \frac{\partial}{\partial \hat{y}}\left(\hat{K}_y \cdot \frac{\partial \hat{q}_3}{\partial \hat{y}} \right) = \xi_3 \cdot \hat{S}_3(\hat{P}_3, \hat{t}),$$

$$\hat{q}_3(\hat{P}, \hat{t}_j) = \hat{q}_2(\hat{P}, \hat{t}_{j+1}),$$

$$\hat{q}_3(\hat{P}_8, \hat{t}) = \hat{\bar{q}}_8(\hat{P}_8, \hat{t}), \; \hat{q}_3(\hat{P}_9, \hat{t}) = \hat{\bar{q}}_9(\hat{P}_9, \hat{t}), \; \hat{t}_j \le \hat{t} \le \hat{t}_{j+1}. \tag{7}$$

Для определения значений исходных данных с целью использования их в последующих расчетах, был создан тестовый пример, условно называемый «Блоком исходных данных». Для задания полей скорости ветра, турбулентной диффузии, концентрации примесей были выбраны функции вида:

$$\hat{V}(\hat{x},\hat{y},\hat{z},\hat{t}) = V_0(1+0.25\sin(av\cdot\hat{x}))\cdot(1+0.25\sin(bv\cdot\hat{y}))\cdot(1+0.25\cos(cv\cdot\hat{z}))\cdot(1+0.25\cos(dv\cdot\hat{t}))$$
$$\hat{K}(\hat{x},\hat{y},\hat{z},\hat{t}) = K_0(1+0.25\sin(ak\cdot\hat{x}))\cdot(1+0.25\sin(bk\cdot\hat{y}))\cdot(1+0.25\sin(ck\cdot\hat{z}))\cdot(1+0.25\cos(dk\cdot\hat{t}))$$
$$\hat{q}(\hat{x},\hat{y},\hat{z},\hat{t}) = q_0(1+\sin\hat{x})\cdot(1+\sin\hat{y})\cdot(1+\sin\hat{z})\cdot(1+\sin\hat{t}). \quad (8)$$

Для определения массива значений функции источника $\hat{S}(\hat{x}_m,\hat{y}_k,\hat{z}_l,\hat{t}_j)=\hat{S}_{m,k,l,j}$ решаем уравнения (5) – (7) относительно $\hat{S}(\hat{x},\hat{y},\hat{z},\hat{t})$, подставляя в него выражения (8). Таким образом, получены массивы значений всех исходных данных $\{\hat{x}_m\}$, $\{\hat{y}_k\}$, $\{\hat{z}_l\}$, $\{\hat{t}_j\}$, $\{\hat{q}_{m,k,l,j}\}$, $\{\hat{V}_{m,k,l,j}\}$, $\{\hat{K}_{m,k,l,j}\}$, $\{\hat{S}_{m,k,l,j}\}$, $m=\overline{0,M}$, $k=\overline{0,K}$, $l=\overline{0,L}$, $j=\overline{0,N}$ и вычислены значения нормировочных констант $q_{\max}$, $V_{\max}$, $K_{\max}$ и $S_{\max}$. Далее приступим к реализации процедур «Блока моделирования» алгоритма вычислительной модели – нахождению неизвестных значений $\{\hat{q}_{m,k,l,j}\}$, $m=\overline{1,M-1}$, $k=\overline{1,K-1}$, $l=\overline{1,L-1}$, $j=\overline{1,N}$ при известных значениях $\{\hat{x}_m\}$, $\{\hat{y}_k\}$, $\{\hat{z}_l\}$, $\{\hat{t}_j\}$, $\{\hat{q}_{m,k,l,j}\}$, $\{\hat{V}_{m,k,l,j}\}$, $\{\hat{K}_{m,k,l,j}\}$, $\{\hat{S}_{m,k,l,j}\}$, $m=\overline{0,M}$, $k=\overline{0,K}$, $l=\overline{0,L}$, $j=\overline{0,N}$; также известными считаются значения $\{\hat{q}_{m,k,l,0}\}$, $m=\overline{0,M}$, $k=\overline{0,K}$, $l=\overline{0,L}$ - начальные условия и граничные условия $\{\hat{q}_{0,k,l,j+1}\}$, $\{\hat{q}_{M,k,l,j+1}\}$ при $k=\overline{1,K-1}$, $l=\overline{1,L-1}$, $j=\overline{0,N-1}$; $\{\hat{q}_{m,0,l,j+1}\}$, $\{\hat{q}_{m,K,l,j+1}\}$ при $m=\overline{1,M-1}$, $l=\overline{1,L-1}$, $j=\overline{0,N-1}$; $\{\hat{q}_{m,k,0,j+1}\}$, $\{\hat{q}_{m,k,L,j+1}\}$ при $m=\overline{1,M-1}$, $k=\overline{1,K-1}$, $j=\overline{0,N-1}$. Для аппроксимации первых производных полей исходных данных использовались центральные разности, второй производной искомого решения - неявная разностная схема. Обобщая все выше изложенное, окончательно получим вычислительный алгоритм решения нестационарного уравнения переноса для случая трех пространственных переменных в виде:

1) $j=\overline{0,N-1}$;

2) $t_j \le t_r \le t_i \le t_{j+1}$,

$$q_1^{(\nu)}(x_m,y_k,z_l,t_i) = \varphi_1(x_m,y_k,z_l,t_i) - \sum_{r=j}^{i}\omega_r\cdot\widetilde{K}(t_i,t_r)\cdot\psi_1^{(\nu-1)}(x_m,y_k,z_l,t_r)\cdot\Delta t,$$

$$\widetilde{K}(t_i,t_r) = \exp\left\{-\sum_{g=r}^{i}\omega_g\cdot\alpha(t_g)\cdot\Delta t\right\},$$

$$\psi_1^{(\nu-1)}(x_m,y_k,z_l,t_r) = \left[\beta_z(t_r)V_z(x_m,y_k,z_l,t_r) - \theta_z(t_r)\cdot\frac{K_z(x_m,y_k,z_l,t_r)-K_z(x_m,y_k,z_{l-1},t_r)}{\Delta z}\right]$$
$$\times\left(\frac{q_1^{(\nu-1)}(x_m,y_k,z_l,t_r)-q_1^{(\nu-1)}(x_m,y_k,z_{l-1},t_r)}{\Delta z}\right) - \theta_z(t_r)K_z(x_m,y_k,z_l,t_r$$
$$\cdot\left(\frac{q_1^{(\nu-1)}(x_m,y_k,z_{l+1},t_r)-2q_1^{(\nu-1)}(x_m,y_k,z_l,t_r)+q_1^{(\nu-1)}(x_m,y_k,z_{l-1},t_r)}{(\Delta z)^2}\right),$$

$$\varphi_1(x_m,y_k,z_l,t_i) = q_1(x_m,y_k,z_l,t_j)\cdot\exp\left\{-\sum_{r=j}^{i}\omega_r\cdot\alpha(t_r)\cdot\Delta t\right\} +$$
$$+\sum_{r=j}^{i}\omega_r\cdot\xi_1(t_r)\cdot S_1(x_m,y_k,z_l,t_r)\cdot\widetilde{K}(t_i,t_r)\cdot\Delta t,$$

$$i=\overline{j,j+1},\ m=\overline{0,M},\ k=\overline{0,K},\ l=\overline{1,L-1},\ q_1^{(0)}(x_m,y_k,z_l,t_i)=\varphi_1(x_m,y_k,z_l,t_i),\ \nu=1,2,\ldots,$$

$q_1(x_m,y_k,z_l,t_j)=q_0(x_m,y_k,z_l)$, если $j=0$, $m=\overline{0,M}$, $k=\overline{0,K}$, $l=\overline{0,L}$;

$q_1(x_m,y_k,z_l,t_j)=q_3(x_m,y_k,z_l,t_j)$, если $j>0$, $m=\overline{0,M}$, $k=\overline{0,K}$, $l=\overline{0,L}$;

$q_1(x_m,y_k,z_0,t_i)=\overline{q}_4(x_m,y_k,0,t_i)$, $q_1(x_m,y_k,z_L,t_i,)=\overline{q}_5(x_m,y_k,1,t_i,)$, $m=\overline{0,M}$, $k=\overline{0,K}$;

если $\left|q_1^{(\nu)}(x_m,y_k,z_l,t_i,)-q_1^{(\nu-1)}(x_m,y_k,z_l,t_i,)\right|\le\varepsilon$, то $q_1(x_m,y_k,z_l,t_i)=q_1^{(\nu)}(x_m,y_k,z_l,t_i)$.

3) $q_2(x_m,y_k,z_l,t_j)=q_1(x_m,y_k,z_l,t_{j+1})$, $m=\overline{0,M}$, $k=\overline{0,K}$, $l=\overline{0,L}$;

4) $t_j\le t_r\le t_i\le t_{j+1}$, $q_2^{(\nu)}(x_m,y_k,z_l,t_i)=\varphi_2(x_m,y_k,z_l,t_i)-\sum_{r=j}^{i}\omega_r\psi_2^{(\nu-1)}(x_m,y_k,z_l,t_r)\cdot\Delta t$,

$$\psi_2^{(\nu-1)}(x_m,y_k,z_l,t_r)=\left[\beta_x(t_r)V_x(x_m,y_k,z_l,t_r)-\theta_x(t_r)\cdot\frac{K_x(x_m,y_k,z_l,t_r)-K_x(x_{m-1},y_k,z_l,t_r)}{\Delta x}\right]$$

$$\times\left(\frac{q_2^{(\nu-1)}(x_m,y_k,z_l,t_r)-q_2^{(\nu-1)}(x_{m-1},y_k,z_l,t_r)}{\Delta x}\right)-\theta_x(t_r)K_x(x_m,y_k,z_l,t_r)\cdot$$

$$\cdot\left(\frac{q_2^{(\nu-1)}(x_{m+1},y_k,z_l,t_r)-2q_2^{(\nu-1)}(x_m,y_k,z_l,t_r)+q_2^{(\nu-1)}(x_{m-1},y_k,z_l,t_r)}{(\Delta x)^2}\right),$$

$$\varphi_2(x_m,y_k,z_l,t_i)=q_2(x_m,y_k,z_l,t_j)+\sum_{r=j}^{i}\omega_r\cdot\xi_2(t_r)\cdot S_2(x_m,y_k,z_l,t_r)\cdot\Delta t,$$

$$i=\overline{j,j+1},\ l=\overline{0,L},\ k=\overline{0,K},\ m=\overline{1,M-1},\ q_2^{(0)}(x_m,y_k,z_l,t_i)=\varphi_2(x_m,y_k,z_l,t_i),\ \nu=1,2,\ldots$$

$q_2(x_0,y_k,z_l,t_i)=\overline{q}_6(0,y_k,z_l,t_i)$, $q_2(x_M,y_k,z_l,t_i)=\overline{q}_7(1,y_k,z_lt_i)$, $l=\overline{0,L}$, $k=\overline{0,K}$;

если $\left|q_2^{(\nu)}(x_m,y_k,z_l,t_i)-q_2^{(\nu-1)}(x_m,y_k,z_l,t_i)\right|\le\varepsilon$, то $q_2(x_m,y_k,z_l,t_i)=q_2^{(\nu)}(x_m,y_k,z_l,t_i)$.

5) $q_3(x_m,y_k,z_l,t_j)=q_2(x_m,y_k,z_l,t_{j+1})$, $m=\overline{0,M}$, $k=\overline{0,K}$, $l=\overline{0,L}$;

6) $t_j\le t_r\le t_i\le t_{j+1}$, $q_3^{(\nu)}(x_m,y_k,z_l,t_i)=\varphi_3(x_m,y_k,z_l,t_i)-\sum_{r=j}^{i}\omega_r\psi_3^{(\nu-1)}(x_m,y_k,z_l,t_r)\cdot\Delta t$,

$$\psi_3^{(\nu-1)}(x_m,y_k,z_l,t_r)=\left[\beta_y(t_r)V_y(x_m,y_k,z_l,t_r)-\theta_y(t_r)\cdot\frac{K_y(x_m,y_k,z_l,t_r)-K_y(x_m,y_{k-1},z_l,t_r)}{\Delta y}\right]$$

$$\times\left(\frac{q_3^{(\nu-1)}(x_m,y_k,z_l,t_r)-q_3^{(\nu-1)}(x_m,y_{k-1},z_l,t_r)}{\Delta y}\right)-\theta_y(t_r)K_y(x_m,y_k,z_l,t_r)$$

$$\cdot\left(\frac{q_3^{(\nu-1)}(x_m,y_{k+1},z_l,t_r)-2q_3^{(\nu-1)}(x_m,y_k,z_l,t_r)+q_3^{(\nu-1)}(x_m,y_{k-1},z_l,t_r)}{(\Delta y)^2}\right),$$

$$\varphi_3(x_m,y_k,z_l,t_i)=q_3(x_m,y_k,z_l,t_j)+\sum_{r=j}^{i}\omega_r\cdot\xi_3(t_r)\cdot S_3(x_m,y_k,z_l,t_r)\cdot\Delta t,$$

$$i=\overline{j,j+1},\ l=\overline{0,L},\ m=\overline{0,M},k=\overline{1,K-1},\ q_3^{(0)}(x_m,y_k,z_l,t_i)=\varphi_3(x_m,y_k,z_l,t_i),\ \nu=1,2,\ldots,$$

$q_3(x_m,y_0,z_l,t_i)=\overline{q}_8(x_m,0,z_l,t_i)$, $q_3(x_m,y_K,z_l,t_i)=\overline{q}_9(x_m,1,z_l,t_i)$, $l=\overline{0,L}$, $m=\overline{0,M}$;

если $\left|q_3^{(\nu)}(x_m,y_k,z_l,t_i)-q_3^{(\nu-1)}(x_m,y_k,z_l,t_i)\right|\le\varepsilon$, то $q_3(x_m,y_k,z_l,t_i)=q_3^{(\nu)}(x_m,y_k,z_l,t_i)$.

7) $j=j+1$;

8) если $j \le N-1$, то $q_1, x_m, y_k, z_l, t_j) = q_3(x_m, y_k, z_l, t_j)$, $m = \overline{0,M}$, $k = \overline{0,K}$, $l = \overline{0,L}$; перейти на шаг 2; иначе – перейти на шаг 9;

9) если $j = N$, то $q(x_m, y_k, z_l, t_j) = q_3(x_m, y_k, z_l, t_j)$, $m = \overline{0,M}$, $k = \overline{0,K}$, $l = \overline{0,L}$.

Исследование сходимости и устойчивости данной вычислительной модели, построенной в рамках методов расщепления, проводится в вычислительном эксперименте.

Примечания:

1. Наац В.И., Наац И.Э. Математические модели и численные методы в задачах экологического мониторинга атмосферы. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. 328 с.

2. Наац В.И., Ярцева Е.П. Численное исследование рекурсивных и итерационных алгоритмов в задаче моделирования переноса аэрозолей в атмосфере // Вестник Ставропольского государственного университета. 2011. Выпуск 75 [4]. С. 44–50.

УДК 519.5, 519.6

Построение вычислительного алгоритма в модели переноса примесей в турбулентной атмосфере на основе нестационарного трехмерного уравнения

Елена Павловна Ярцева

Северо – Кавказский федеральный университет, Россия
355000, г. Ставрополь, ул. Пушкина, 1
соискатель
E-mail: yartseva_elena@mail.ru

Аннотация. В статье рассматривается построение вычислительного алгоритма в модели переноса примесей в турбулентной атмосфере на основе нестационарного трехмерного уравнения.

Ключевые слова: математические модели теории переноса; вычислительный алгоритм; численные исследования.