2.7. Уравнение атмосферной диффузии

2.7.1. Модель атмосферной диффузии

Модели атмосферной диффузии — инструмент для оценки и прогнозирования негативных последствий существующих и ожидаемых выбросов в атмосферу токсичных примесей, и принятия решений с целью минимизации этих последствий.

От качества принимаемых решений зависит здоровье людей, экологическая безопасность, состояние окружающей среды, эффективность капиталовложений в атмосфероохранные мероприятия и др.

Вывод: к точности модельных предсказаний должны предъявляться особо жесткие требования.

$$\frac{\partial c}{\partial t} + U_i \frac{\partial c}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} K_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_i} - \alpha c + S,$$

 U_i — компоненты средней скорости потока; K_{ij} — коэффициенты турбулентной диффузии; α — коэффициент, учитывающий радиоактивный распад или вымывание осадками; S — источники и стоки рассматриваемой примеси.

УАД выражает закон сохранения потока примеси. Условия распространения примесей задаются коэффициентами.

Мы будем рассматривать задачу установившейся турбулентной диффузии для легкой примеси в термически стратифицированном 8 приземном слое атмосферы.

Ось x направим вдоль ветра, ось y перпендикулярно ей, ось z вертикально вверх.

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} =$$

⁸ Стратификация атмосферы – распределение температуры воздуха по высоте, характеризуемое вертикальным градиентом температуры. От стратификации атмосферы зависит устойчивость по отношению к вертикальным перемещениям воздуха. При неустойчивой стратификации температура воздуха с высотой уменьшается, вертикальные пульсации в воздушном потоке и его турбулентность усиливаются. При устойчивой стратификации температуры, характеризующейся ростом температуры с высотой, турбулентность ослабляется. Такой профиль температуры возникает в случаях, когда атмосферный воздух теплее, чем подстилающая поверхность.

$$=\frac{\partial}{\partial x}k_{x}\frac{\partial c}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial y}k_{y}\frac{\partial c}{\partial y}+\frac{\partial}{\partial z}k_{z}\frac{\partial c}{\partial z}-\alpha c+M\delta\left(x\right)\delta\left(y\right)\delta\left(z-H\right)\ (2.10)$$

Запишем граничные условия.

Концентрация примеси на бесконечном удалении от источника убывает до нуля:

$$c\mid_{z\to\infty}\to 0$$

$$c\mid_{y\to-\infty}=c\mid_{y\to\infty}=0.$$

Средний турбулентный поток примеси у земной поверхности мал:

$$k_z \frac{\partial c}{\partial z} \mid_{z=0} \to 0.$$

$$c \mid_{x < 0} = 0$$

$$k_x \frac{\partial c}{\partial x} \mid_{x \to \infty} \to 0$$

Упростим уравнение (2.10), сделав следующие предположения:

• диффузионный процесс установился

$$\frac{\partial c}{\partial t} = 0;$$

- так как ось x ориентирована в направлении ветра, то v = 0;
- будем рассматривать случай, когда примесь легкая и консервативная; для легкой примеси, не имеющей собственной скорости осаждения, можно принять w=0; для консервативной примеси $\alpha=0$;
- вертикальные движения в атмосфере над горизонтальной однородной подстилающей поверхностью малы по сравнению с горизонтальными;
- диффузионный поток примеси вдоль оси *х* значительно меньше конвективного (из практических наблюдений можно сказать, что

дым почти не распространяется против ветра):

$$u\frac{\partial c}{\partial x} \gg k_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}.$$

Тогда уравнение (2.10) примет вид:

$$u\frac{\partial c}{\partial x} = k_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + k_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + M\delta(x) \delta(y) \delta(z - H).$$

2.7.2. Задача атмосферной диффузии для стационарного точечного источника

Рассмотрим стационарный точечный источник мощностью M.

$$u\frac{\partial c}{\partial x} = k_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + k_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}.$$
 (2.11)

Здесь u(z) — профиль скорости ветра по высоте, k_z , k_y — коэффициенты обмена в турбулентном потоке.

Уравнение имеет первый порядок по переменной x и второй порядок по переменным y и z. Поэтому должно быть поставлено одно начальное условие по x и два граничных условия по переменным y и z. Выбросы примеси в атмосферу осуществляются от объемных источников. Однако размеры этих источников малы по сравнению с расстояниями, на которых исследуется создаваемое ими поле концентрации. Поэтому при постановке начальных условий рассматривают только точечные или линейные источники.

Для точечного источника высотой H, расположенного в точке $x=0,\,y=0,\,z=H$ начальное условие

$$c\mid_{x=0} = \frac{M}{u_H} \delta(z - H) \delta(y), \qquad (2.12)$$

где M — мощность источника, выброс вещества от источника в единицу времени; H — высота источника; u_H — скорость ветра на высоте H.

Граничные условия

$$c\mid_{|y|\to\infty}\to 0, \ c\mid_{|z|\to\infty}\to 0, \ k_z\frac{\partial c}{\partial z}\mid_{z=0}=0.$$
 (2.13)

 $\delta(y)$, $\delta(z-H)-\delta$ -функции Дирака, при упрощенном описании можно полагать, что эта функция характеризуется следующими свойствами:

$$\delta(x) = \begin{cases} 0, & x \neq 0, \\ \infty, & x = 0 \end{cases} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(x) dx = 1,$$

где ε – любое положительное число.

С увеличением высоты размеры вихрей, обусловливающих турбулентный обмен, возрастают в приземном слое $(z \le h)$ и сравнительно мало изменяются при (z > h). Для вихрей этого масштаба можно полагать, что атмосферная турбулентность выше приземного слоя имеет примерно изотропный характер, вследствие чего $k_x \approx k_y \approx k_z$.

А в приземном слое поскольку влияние подстилающей поверхности на вертикальную компоненту коэффициента обмена больше, чем на горизонтальную, то степень возрастания с высотой k_y меньше, чем для k_z . Это условие выполняется, если представить коэффициент k_y в виде $k_y = k_0 u$ (z), так как в приземном слое u растет примерно логарифмически с высотой, а $k_z \sim z$. Здесь $k_0 = \text{const}$ имеет размерность длины. Величина k_0 составляет 0,1-1 м в зависимости от степени устойчивости атмосферы [12]. Однако с учетом колебаний направления ветра реальный процесс турбулентной диффузии описывается аналогичным соотношением, в котором k_0 зависит от расстояния до источника.

2.7.3. Переход к задаче атмосферной диффузии для линейного источника

Решение задач атмосферной диффузии требует их определенной стилизации и упрощения. Чтобы решить задачу для точечного источника перейдём к решению задачи для линейного источника.

Рассмотрим уравнение диффузии

$$u\frac{\partial c}{\partial x} = k_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial z} k_z \frac{\partial c}{\partial z}$$

в предположении $u=u(z), k_z=k_z(z),$ т. е. u и k_z являются функциями только высоты z . Коэффициент диффузии по y запишем как 9

 $^{^9}$ Для больших расстояний x от источника [12] коэффициент k_0 , используемый при решении уравнения (2.11) заменяется некоторым эффективным коэффициентом k_0 (x),

$$k_{v}(x, z) = k_{0}(x) \cdot u(z)$$
. (2.14)

Переходим от уравнения (2.11), граничных и начального условий (2.12)—(2.13) для точечного источника к соответствующим уравнениям, граничным и начальному условиям для линейного источника. Для этого решение задачи представим в виде:

$$c(x, y, z) = c'(x, z) \cdot c''(x, y).$$

Функция c''(x, y) – решение уравнения

$$\frac{\partial c''}{\partial x} = k_0(x) \cdot \frac{\partial^2 c''}{\partial y^2} \tag{2.15}$$

с начальным условием

$$c''(x, y)|_{x=0} = \delta(y)$$
 (2.16)

и граничным условием обращения c'' в ноль на бесконечности

$$c''(x, y)|_{y \to \pm \infty} = 0.$$
 (2.17)

Функция c'(x, y) – удовлетворяет уравнению

$$u\frac{\partial c'}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} k_z \frac{\partial c'}{\partial z} \tag{2.18}$$

с начальным условием

$$c' \mid_{x=0} = \frac{M}{u} \delta(z - H)$$
 (2.19)

и граничными условиями

$$k_z \frac{\partial c'}{\partial z} \mid_{z=0} = 0, \quad c' \mid_{z \to \infty} \to 0.$$
 (2.20)

Подставим выражение (2.15) в (2.11) и условия (2.12)–(2.13), учитывая (2.15)–(2.17).

Решение задачи (2.15) и (2.16)–(2.17), получаемое после замены переменной,

изменяющимся с расстоянием от источника.

$$X = \int_{0}^{x} k_0(\xi) d\varsigma$$

имеет вид

$$c''(x,y) = \frac{1}{\sigma_y(x)\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2(x)}\right),$$
 (2.21)
$$\sigma_y^2(x) = 2\int_0^x k_0(x) dx.$$

Ограничившись первыми двумя членами разложения $k_0(x)$ в ряд Тейлора, т. е. полагая, что величина $k_0(x) \approx k_{00} + \phi_0^2 x$, где ϕ_0 имеет смысл дисперсии колебаний направления ветра за период времени осреднения, получаем

$$\sigma_y^2(x) = 2k_{00}x + \varphi_0^2 x^2.$$

Выполненные оценки показали, что уже на сравнительно близких к источнику расстояниях второе слагаемое в этой формуле существенно больше первого. В результате выражение для c'' приобретает вид:

$$c''(x, y) = \frac{1}{\varphi_0 x \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{y^2}{2\varphi_0^2 x^2}\right).$$

По смыслу c'(x,y) является концентрацией от бесконечного линейного источника, расположенного вдоль оси y. При этом мощности точечного и линейного источников M совпадают численно, но по своему физическому содержанию и размерности величины M в (2.12) и (2.19) отличаются. Для точечного источника M определяет количество примеси, поступающей в единицу времени. Для линейного источника M – количество примеси, поступающее в единицу времени от единицы длины источника. Решения для точечного и линейного источников (c и c') связаны соотношением:

$$c(x, y, z) = \frac{c'(x, z)}{\varphi_0 x \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{y^2}{2\varphi_0^2 x^2}\right).$$

Это соотношение получено при весьма общих предположениях относительно зависимости u и k_z от высоты z.

Использование аналитических методов для решения приведенных уравнений диффузии возможно при значительных упрощениях и стилизации реальных условий в атмосфере. Уже при сравнительно простых условиях, когда скорость ветра изменяется логарифмически с высотой, нарушается линейное или степенное возрастание коэффициента обмена и т. п., возникают существенные трудности при попытках получить аналитические решения.

Вместе с тем необходимо учитывать, что толщина слоя воздуха, в котором происходит рассеивание примеси от промышленных предприятий, может быть весьма большой, особенно в случаях мощных источников с высотой труб 200-300 м, выбросы от которых распространяются на большие расстояния. В таком слое изменения скорости ветра и составляющих коэффициента обмена нередко имеют сложный характер. Поэтому часто нельзя ограничиться данными о скорости ветра и коэффициенте обмена не посредственно у подстилающей поверхности, а необходимо принять их реальное распределение во всем слое распространения примеси. Исследование атмосферной диффузии в пересеченной местности и над неоднородной подстилающей поверхностью также требует учета сложных изменений метеорологических элементов, как в вертикальном, так и горизонтальном направлениях.

Несмотря на большие возможности современной вычислительной техники следует разумно упрощать постановку задачи. Это позволяет существенно сократить затраты машинного времени. Кроме того, усложнение задачи имеет смысл только при достаточном развитии методов нахождения параметров этой задачи. При численном решении целесообразно использовать соотношение $k_y = k_0(x)u$ и перейти от уравнения для концентрации от точечного источника к уравнению для концентрации от линейного источника, уменьшая при этом число переменных задачи и значительно упрощая и ускоряя вычисления.

Для расчета концентрации примеси можно положить

$$u(z) = u_1 \frac{\ln\left(\frac{z+z_0}{z_0}\right)}{\ln\left(\frac{z_1+z_0}{z_0}\right)},$$

где z_0 – шероховатость подстилающей поверхности, u_1 – скорость вет-

ра на высоте z_1 ;

$$k_z = \begin{cases} k_1 (z + z_0), & z \le h, \\ k_1 (z + h), & z > h, \end{cases}$$

h – высота приземного слоя, k_1 – известная функция.

Для постоянной скорости u приведем аналитическое решение уравнения (2.11) для точечного источника, которое запишется в виде [12]

$$c = \frac{M}{4\pi x \sqrt{k_y k_z}} \exp\left(-\frac{uy^2}{4k_y x}\right) \times \left\{ \exp\left[-\frac{u(z+H)^2}{4k_z x}\right] + \exp\left[-\frac{u(z-H)^2}{4k_z x}\right] \right\},$$

$$k_y = k_0 u,$$
(2.22)

где, как отмечалось выше, $k_0 = \text{const}$ имеет размерность длины.

Аналитическое решение согласно (2.22) показано на рис. 2.1. Параметры источника M=1,4 кг/с, H=100 м; коэффициент вертикального турбулентного обмена $k_z=5$ м²/с, коэффициент $k_0=0,5$ м; скорость ветра u=5 м/с.

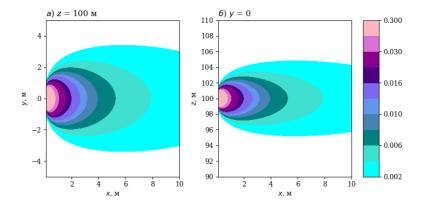


Рис. 2.1. Аналитическое решение по формуле (2.22), распределение концентрации: а) линии уровня при z=100 м; б) при y=0

2.8. Численное решение уравнения

Для численного решения задачи (2.18)–(2.20) используется метод конечных разностей.

Рассмотрим равномерную сетку $\omega_x = \left\{ x_i = i \Delta x, \ i = \overline{0, N} \right\}$ с шагом Δx . Пусть f(x) – произвольная, достаточно гладкая функция, заданная на отрезке $[x_{i-1}; x_{i+1}]$. Значения функции в узлах сетки обозначим $f_i = f(x_i)$.

По формуле Тейлора

$$f\left(x\pm\Delta x\right)=f\left(x\right)\pm\Delta xf'\left(x\right)+\frac{\Delta x^{2}}{2}f''\left(x\right)\pm\frac{\Delta x^{3}}{6}f'''\left(x\right)+O\left(\Delta x^{4}\right),$$

отсюда получаем выражение для левой разностной производной функции f(x)

$$\frac{f\left(x_{i}\right) - f\left(x_{i} - \Delta x\right)}{\Delta x} = \frac{f\left(x_{i}\right) - f\left(x_{i-1}\right)}{\Delta x} =$$

$$= f'\left(x_{i}\right) - \frac{\Delta x}{2}f''\left(x_{i}\right) + \frac{\Delta x^{2}}{6}f'''\left(x_{i}\right) + O\left(\Delta x^{3}\right),$$

$$f'_{i} = \frac{f_{i} - f_{i-1}}{\Delta x} + O\left(\Delta x\right).$$

Аналогично правая разностная производная f(x)

$$\frac{f\left(x_{i} + \Delta x\right) - f\left(x_{i}\right)}{\Delta x} = \frac{f\left(x_{i+1}\right) - f\left(x_{i}\right)}{\Delta x} =$$

$$= f'\left(x_{i}\right) + \frac{\Delta x}{2}f''\left(x_{i}\right) + \frac{\Delta x^{2}}{6}f'''\left(x_{i}\right) + O\left(\Delta x^{3}\right),$$

$$f'_{i} = \frac{f_{i+1} - f_{i}}{\Delta x} + O\left(\Delta x\right).$$

Таким образом, левая и правая разностные производные аппроксимируют $f'(x_i)$ с первым порядком точности по Δx .

Запишем разностную аппроксимацию для дифференциального выражения

$$\frac{d}{dx}\left(k\left(x\right)\frac{df}{dx}\right) = \frac{1}{\Delta x}\left(a_{i+1}\frac{f_{i+1}-f_{i}}{\Delta x} - a_{i}\frac{f_{i}-f_{i-1}}{\Delta x}\right) + O\left(\Delta x^{2}\right),$$

где условиям для получения второго порядка аппроксимации удовлетворяют, например, следующие функции [13]

$$a_i = 0, 5 (k_i + k_{i-1}), \quad a_i = k \left(x_{i-1} + \frac{\Delta x}{2} \right), \quad a_i = \sqrt{k_i k_{i-1}}.$$
 (2.23)

Запишем в конечно-разностной форме уравнение

$$\begin{split} u\frac{\partial c'}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial z}k_z\frac{\partial c'}{\partial z},\\ c'\mid_{x=0} &= \frac{M}{u}\delta\left(z-H\right), \ k_z\frac{\partial c'}{\partial z}\mid_{z=0} &= 0, \ c'\mid_{z\to\infty} &\to 0, \end{split}$$

где $u = u(z), k_z = k_z(z).$

В рассматриваемой задаче исследуется полуограниченная среда: верхнее граничное условие задается при $z\to\infty$. Но поскольку на некоторой достаточно большой высоте концентрация примеси практически исчезает, этот уровень может быть задан в качестве верхней границы области интегрирования. Далее будем считать, что область определения решения задачи (2.18)–(2.20) представляет прямоугольник в плоскости x0z: $D=\{0\le x\le X,\ 0\le z\le Z\}$. Введем равномерную сетку $\Omega_{xz}=\{x_j=j\Delta x,\ j=0,1,\ldots,M;\ z_i=i\Delta z,\ i=1,2,\ldots,N\}$. Обозначим $u_i=u\ (z_i),\ c_i^j=c'\ (x_j,z_i);\ k_i=k_z\ (z_i)$. Разностный коэффициент вертикального турбулентного обмена должен удовлетворять условиям второго порядка аппроксимации: $k_{i-1/2}$ вычисляется по формуле (Берлянд, 1975)

$$k_{i-1/2} = \frac{k_i - k_{i-1}}{\ln k_i - \ln k_{i-1}}$$

(Самарский, 2003 с. 265-266.)

$$k_{i-1/2} = 0, 5 (k_i + k_{i-1}), \ k_{i-1/2} = k_z \left(z_{i-1} + \frac{\Delta z}{2} \right), \ k_{i-1/2} = \frac{2k_{i-1}k_i}{k_{i-1} + k_i}$$

Шаблоном называется упорядоченная совокупность узлов разностной сетки, значения сеточной функции в которых объединены одним разностным уравнением.

Аппроксимируем производную по х в уравнении (2.18) левой раз-

ностной производной

$$\left(\frac{\partial c'}{\partial x}\right)_{i}^{j} = \frac{c_{i}^{j} - c_{i}^{j-1}}{\Delta x} + O\left(\Delta x\right).$$

Если дифференциальный оператор в правой части заменить разностным отношением на j-1-м слое

$$\frac{\partial}{\partial z} k_z \frac{\partial}{\partial z} c' \left(x_j, z_i \right) = \left(\frac{\partial}{\partial z} k_z \frac{\partial c'}{\partial z} \right)_i^{j-1} =$$

$$=\frac{k_{i+1/2}\left(c_{i+1}^{j-1}-c_{i}^{j-1}\right)-k_{i-1/2}\left(c_{i}^{j-1}-c_{i-1}^{j-1}\right)}{\Delta z^{2}}+O\left(\Delta z^{2}\right),$$

то получим явную схему

$$u_{i}\frac{c_{i}^{j}-c_{i}^{j-1}}{\Delta x} = \frac{k_{i+1/2}\left(c_{i+1}^{j-1}-c_{i}^{j-1}\right)-k_{i-1/2}\left(c_{i}^{j-1}-c_{i-1}^{j-1}\right)}{\Delta z^{2}},$$
 (2.24)

$$i = \overline{1, N - 1}, j = \overline{1, M}.$$

Разностное уравнение (2.25) аппроксимирует исходное дифференциальное уравнение с погрешностью $O\left(\Delta x + \Delta z^2\right)$, т. е. с первым порядком точности по x и вторым порядком точности по z. Схема является устойчивой при выполнении условия, которое при постоянных u и k_z записывается как

$$\Delta x < \frac{u\Delta z^2}{2k_z}.$$

В неявной схеме

$$\left(\frac{\partial}{\partial z}k_z\frac{\partial c'}{\partial z}\right)_i^j = \frac{k_{i+1/2}\left(c_{i+1}^j - c_i^j\right) - k_{i-1/2}\left(c_i^j - c_{i-1}^j\right)}{\Delta z^2} + O\left(\Delta z^2\right),$$

$$u_{i}\frac{c_{i}^{j}-c_{i}^{j-1}}{\Delta x}=\frac{k_{i+1/2}\left(c_{i+1}^{j}-c_{i}^{j}\right)-k_{i-1/2}\left(c_{i}^{j}-c_{i-1}^{j}\right)}{\Delta z^{2}},$$
(2.25)

$$i = \overline{1, N-1}, j = \overline{1, M}.$$

Погрешность аппроксимации $O\left(\Delta x + \Delta z^2\right)$. Схема является абсолютно устойчивой.

Схема с весами

$$u_{i} \frac{c_{i}^{j} - c_{i}^{j-1}}{\Delta x} = \sigma \frac{k_{i+1/2} \left(c_{i+1}^{j} - c_{i}^{j} \right) - k_{i-1/2} \left(c_{i}^{j} - c_{i-1}^{j} \right)}{\Delta z^{2}} + \left(1 - \sigma \right) \frac{k_{i+1/2} \left(c_{i+1}^{j-1} - c_{i}^{j-1} \right) - k_{i-1/2} \left(c_{i}^{j-1} - c_{i-1}^{j-1} \right)}{\Delta z^{2}}, \tag{2.26}$$

где σ – вес неявной части конечно-разностной схемы, σ – 1 – вес явной части схемы При σ = 0 получим в (2.26) явную схему (2.24), при σ = 1 – чисто неявную схему (2.25), для σ = 0,5 – шеститочечную симметричную схему (схема Кранка-Николсона)

$$u_{i} \frac{c_{i}^{j} - c_{i}^{j-1}}{\Delta x} = \frac{k_{i+1/2} \left(c_{i+1}^{j} - c_{i}^{j} \right) - k_{i-1/2} \left(c_{i}^{j} - c_{i-1}^{j} \right)}{2\Delta z^{2}} + \frac{k_{i+1/2} \left(c_{i+1}^{j-1} - c_{i}^{j-1} \right) - k_{i-1/2} \left(c_{i}^{j-1} - c_{i-1}^{j-1} \right)}{2\Delta z^{2}}.$$

После перегруппировки слагаемых

$$\begin{split} k_{i+1/2}c_{i+1}^{j} - \left(k_{i+1/2} + k_{i-1/2} + \frac{2u_{i}\Delta z^{2}}{\Delta x}\right)c_{i}^{j} + k_{i-1/2}c_{i-1}^{j} = \\ = -\frac{2u_{i}\Delta z^{2}}{\Delta x}c_{i}^{j-1} - k_{i+1/2}\left(c_{i+1}^{j-1} - c_{i}^{j-1}\right) - k_{i-1/2}\left(c_{i-1}^{j-1} - c_{i}^{j-1}\right) \end{split}$$

Рассмотрим аппроксимацию граничных условий. Граничное условие на уровне подстилающей поверхности содержит производную

$$\frac{\partial c}{\partial z}|_{z=0} = 0.$$

Заменим ее односторонней разностной производной

$$\frac{c_1^j - c_0^j}{\Delta z} = 0, \ j = \overline{0, M}$$

Явная разностная схема для задачи (2.18)–(2.20)

$$\begin{cases} u_{i} \frac{c_{i}^{j+1} - c_{i}^{j}}{\Delta x} = \frac{k_{i+1/2} \left(c_{i+1}^{j} - c_{i}^{j} \right) - k_{i-1/2} \left(c_{i}^{j} - c_{i-1}^{j} \right)}{\Delta z^{2}}, \\ c_{i}^{0} = \frac{M}{u_{H} \Delta z}, z_{i} = H \\ c_{0}^{j} = c_{1}^{j}, c_{N}^{j} = 0, j = \overline{0, M}, \end{cases}$$

$$i = \overline{1, N-1}, j = \overline{0, M-1}$$

$$(2.27)$$

Записанная разностная схема представляет собой систему линейных алгебраических уравнений, в которой число уравнений равно числу неизвестных. Решение системы находится по слоям. При j=0 значение c определяется из начальных условий, далее последовательно для каждого значения $j=0,1,2,\ldots,M-1$ вычисляется

$$\begin{split} c_{i}^{j+1} &= c_{i}^{j} + \frac{\Delta x}{u_{i}\Delta z^{2}} \left[k_{i+1/2} \left(c_{i+1}^{j} - c_{i}^{j} \right) - k_{i-1/2} \left(c_{i}^{j} - c_{i-1}^{j} \right) \right] = \\ &= \frac{\Delta x}{u_{i}\Delta z^{2}} k_{i+1/2} \cdot c_{i+1}^{j} + \left[1 - \frac{\Delta x}{u_{i}\Delta z^{2}} \left(k_{i+1/2} + k_{i-1/2} \right) \right] \cdot c_{i}^{j} + \frac{\Delta x}{u_{i}\Delta z^{2}} k_{i-1/2} \cdot c_{i-1}^{j}, \\ &= \overline{1, N-1}, \end{split}$$

а из аппроксимации граничных условий находятся значения при i=0 и i=N

$$c_0^j = c_1^j, \ c_N^j = 0.$$

Результаты расчетов по (2.27) при тех же значениях параметров (k и u константы), что и в аналитическом решении (рис. 2.1) показаны на рис.....

Неявная разностная схема для задачи (2.18)–(2.20)

$$\begin{cases} u_{i} \frac{c_{i}^{j+1} - c_{i}^{j}}{\Delta x} = \frac{k_{i+1/2} \left(c_{i+1}^{j+1} - c_{i}^{j+1} \right) - k_{i-1/2} \left(c_{i}^{j+1} - c_{i-1}^{j+1} \right)}{\Delta z^{2}}, \\ c_{i}^{0} = \frac{M}{u_{H} \Delta z}, z_{i} = H \\ c_{0}^{j+1} = c_{1}^{j+1}, c_{N}^{j+1} = 0, j = \overline{0, M}, \end{cases}$$

$$(2.28)$$

$$i = \overline{1, N-1}, j = \overline{0, M-1}$$

Перепишем уравнения во внутренних узлах сетки

$$\frac{k_{i-1/2}}{\Delta z^2} c_{i-1}^{j+1} - \left(\frac{k_{i+1/2} + k_{i-1/2}}{\Delta z^2} + \frac{u_i}{\Delta x}\right) c_i^{j+1} + \frac{k_{i+1/2}}{\Delta z^2} c_{i+1}^{j+1} = -\frac{u_i}{\Delta x} c_i^j,$$

$$i = \overline{1, N-1}, \ j = \overline{0, M-1}$$

После умножения на Δz^2

$$k_{i-1/2}c_{i-1}^{j+1} - \left(k_{i+1/2} + k_{i-1/2} + \frac{u_i\Delta z^2}{\Delta x}\right) + k_{i+1/2}c_{i+1}^{j+1} = -\frac{u_i\Delta z^2}{\Delta x}c_i^j$$

Обозначив

$$A_i = k_{i-1/2}, \ C_i = k_{i+1/2} + k_{i-1/2} + \frac{u_i \Delta z^2}{\Delta x}, \ B_i = k_{i+1/2}, \ F_i = \frac{u_i \Delta z^2}{\Delta x} c_i^j,$$

$$\chi_1 = 1, \ \mu_1 = 0, \ \chi_2 = 0, \ \mu_2 = 0$$

и добавив граничные условия, получим для каждого $j=\overline{0,M-1}$ систему линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей коэффициентов

$$\begin{cases} c_0^{j+1} = \chi_1 c_1^{j+1} + \mu_1 \\ A_i c_{i-1}^{j+1} - C_i c_i^{j+1} + B_i c_{i+1}^{j+1} = -F_i, \ i = \overline{1, N-1}, \\ c_N^{j+1} = \chi_2 c_{N-1}^{j+1} + \mu_2, \end{cases}$$

решение которой находится методом прогонки.

Первое и последнее уравнения в методе прогонки записываются как

$$-C_0c_0^{j+1}+B_0c_1^{j+1}=-F_0,\ A_Nc_{N-1}^{j+1}-C_Nc_N^{j+1}=-F_N.$$

Сравнивая с граничными условиями, получим

$$C_0 = 1$$
, $B_0 = \chi_1$, $F_0 = \mu_1$,

$$C_N = 1$$
, $A_N = \chi_2$, $F_0 = \mu_2$

В методе прогонки решение ищется в виде

$$c_i^{j+1} = \alpha_i c_{i+1}^{j+1} + \beta_i. \tag{2.29}$$

На прямом ходе метода прогонки вычисляются значения коэффициентов прогонки

Начальные значения коэффициентов прогонки определяются как

$$\alpha_0 = \chi_1 = \frac{B_0}{C_0}, \ \beta_0 = \mu_1 = \frac{F_0}{C_0}.$$

Дальше коэффициенты вычисляются по формулам

$$\alpha_{i} = \frac{B_{i}}{C_{i} - \alpha_{i-1}A_{i}}, \ \beta_{i} = \frac{A_{i}\beta_{i-1} + F_{i}}{C_{i} - \alpha_{i-1}A_{i}}, \ i = \overline{1, N-1},$$

$$\alpha_{N} = \frac{B_{N}}{C_{N} - \alpha_{N-1}A_{N}} = 0, \ \beta_{N} = \frac{A_{N}\beta_{N-1} + F_{N}}{C_{N} - \alpha_{N-1}A_{N}} = \frac{\chi_{2}\beta_{N-1} + \mu_{2}}{1 - \alpha_{N-1}\chi_{2}}.$$

На обратном ходе метода прогонки

$$c_N^{j+1} = \beta_N,$$

и по формулам (2.29) определяются все значения c на j+1 слое. Таким образом, для неявной схемы при j=0 значение c определяется из начальных условий, далее для каждого значения $j=1,2,\ldots,M$ решается система линейных уравнений методом прогонки.

Для устойчивости метода прогонки должно выполняться достаточное условие диагонального преобладания матрицы

$$A_i > 0, \ B_i > 0, \ C_i \ge A_i + B_i, \ C_i \ne A_i + B_i, \ i = \overline{1, N - 1},$$

$$0\leq\chi_p\leq 1,\;p=1,2.$$

Выполнение этих условий в рассматриваемой задаче очевидно, так как k и u положительны.

Список литературы

- 1. Гальперин М. В. Экологические основы природопользования: Учебник. – М.: ФОРУМ: ИНФРА-М, 2003. – 256 с.
- 2. Матвеев Л. Т. Курс общей метеорологии. Физика атмосферы. Л.: Гидрометеоиздат. 1984. 752 с.
- 3. Мониторинг и методы контроля окружающей среды: Учеб, пособие в двух частях: Часть 2. Специальная / Ю. А. Афанасьев, С. А. Фомин, В. В. Меньшиков и др. М.: Изд-во МНЭПУ, 2001. 337 с.
- 4. Будилова Е. В., Дрогалина Ж. А., Терехин А. Т. Основные направления современной экологии и ее математический аппарат: анализ публикаций // Журн. общ. биол. 1995. Т. 56. № 2. С. 179–189.
- 5. Монин А. С., Яглом А. М. Статистическая гидромеханика. Теория турбулентности: [В 2 т.] / А. С. Монин, А. М. Яглом. [2-е изд.]. СПб.: Гидрометеоиздат, 1992.
- 6. Аргучинцев В. К. Динамическая метеорология [Электронный ресурс] : учеб. пособие / В. К. Аргучинцев. 2-е изд., испр. и доп. Иркутск : Изд-во Иркут. гос. ун-та, 2009. 179 с. URL: https://rucont.ru/efd/145314 (дата обращения: 15.06.2020).
- 7. Вшивкова О. В. Физика Земли и атмосферы. Влияние атмосферы на результаты геодезических измерений: Учебное пособие. М.: МИИГАиК. 2017. 88 с.
 - 8. https://keelingcurve.ucsd.edu/
- 9. Хабутдинов Ю. Г. , Шанталинский К. М., Николаев А. А. Учение об атмосфере: Учебное пособие. Казань: Изд-во Казанск. гос. ун-та, 2010.-256 с.
- 10. Аргучинцева А. В., Аргучинцев В. К., Вологжина С. Ж. Тенденции и уровень решения проблемы оценки загрязнения атмосферы. Известия Иркут. гос. ун-та. Серия «Науки о Земле», 2009. Т. 2, № 2. С. 20–36.
- 11. Методы расчетов рассеивания вредных (загрязняющих) веществ в атмосферном воздухе. Утв. Приказом Минприроды России от 06.06.2017 г. № 273. М.: Ростехнадзор, 2017. 110 с.
- 12. Берлянд М. Е. Современные проблемы атмосферной диффузии и загрязнения атмосферы / М. Е. Берлянд. Л. : Гидрометеоиздат, 1975. 448 с.
- 13. Самарский А. А., Гулин А. В. Численные методы математической физики. М.: Научный мир, 2003. 316 с. –

URL: https://www.rfbr.ru/rffi/portal/books/o_38593 (дата обращения: 05.07.2020).