

## Численные эксперименты

### Одномерное уравнение

Рассмотрим следующую задачу для электронной концентрации  $n$ :

$$\begin{cases} \frac{\partial n}{\partial t} = P - kn + \frac{\partial}{\partial z} \left( D \frac{\partial n}{\partial z} + un \right) \\ n|_{z=100 \text{ км}} = \frac{P(z=100 \text{ км})}{k(z=100 \text{ км})} \\ \left( D \frac{\partial n}{\partial z} + un \right) \Big|_{z=500 \text{ км}} = F = const \end{cases}$$

Здесь  $D$  — коэффициент амбиполярной диффузии,  $u = D \left( \frac{1}{T_p} \frac{\partial T_p}{\partial z} + \frac{m_i g}{2kT_p} \right)$  — эффективная скорость,  $P$  и  $kn$  — слагаемые, отвечающие процессам ионизации при столкновении  $O$  и  $O+$  и рекомбинации соответственно. В используемой модели температура, концентрация нейтралов, зависимости  $D(z)$ ,  $k(z)$  и  $P_1(z)$  — внешние параметры.

Вблизи нижней границы влияние диффузионного слагаемого и переноса пренебрежимо малы по сравнению с процессами фотохимии. Напротив, на верхней части исследуемого высотного интервала преобладают диффузионные процессы, а  $P$  и  $k$  уже не играют роли. Важной особенностью рассматриваемой задачи является изменение входящих в уравнение коэффициентов  $D, P, k, u$  на рассматриваемом отрезке на несколько порядков. Характерные величины на нескольких высотах представлены в следующей таблице:

	$z_1 = 200 \text{ км}$	$z_2 = 300 \text{ км}$	$z_3 = 500 \text{ км}$
$D, \text{см}^2 \cdot \text{с}^{-1}$	$3,1 \cdot 10^9$	$3,4 \cdot 10^{10}$	$4,2 \cdot 10^{12}$
$k, \text{с}^{-1}$	$5,2 \cdot 10^{-3}$	$5,5 \cdot 10^{-5}$	$1,3 \cdot 10^{-8}$
$P_1, \text{см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$	$1,5 \cdot 10^3$	$1,2 \cdot 10^2$	1,3
$u_{\text{эфф}}/D, \text{см}^{-1}$	$4,8 \cdot 10^{-8}$	$4,5 \cdot 10^{-8}$	$3,6 \cdot 10^{-8}$

Характерные времена различных физических процессов существенно различны, поэтому рассматриваемая задача жесткая. Следовательно, по времени рассматриваем неявные схемы: во всех случаях производную по времени аппроксимируем по формуле  $\frac{\partial n}{\partial t} \approx \frac{n^{j+1} - n^j}{\tau}$ , а в правой части все слагаемые берём

на следующем временном слое с номером  $(j + 1)$ . С учётом этого замечания далее в записи различных аппроксимаций правой части будем писать только нижние индексы у  $n$ , подразумевая всегда верхний индекс  $(j + 1)$ .

От разностной схемы требуется выполнение закона сохранения массы, а также сохранение неотрицательности значений  $n$  на следующем временном слое, если это свойство было выполнено на предыдущем. Эти требования связаны с отсутствием физического смысла у решений, не сохраняющих массу или содержащих отрицательные значения концентрации.

Перейдем к получению используемых разностных схем. Введём следующие обозначения для шагов по пространству:

$$h_i = z_{i+1} - z_i$$

$$h_{i+1/2} = z_{i+1/2} - z_{i-1/2}$$

В точке  $z = z_i$  для слагаемого  $\frac{\partial}{\partial z} D \frac{\partial n}{\partial z}$  в разностных схемах используется следующая аппроксимация, полученная двойным применением формулы центральной разности на отрезках  $[z_{i-1}; z_i]$  и  $[z_i; z_{i+1}]$ :

$$\frac{\partial}{\partial z} D \frac{\partial n}{\partial z} \approx \frac{1}{h_{i+1/2}} \left( \frac{D_{i+1/2}(n_{i+1} - n_i)}{h_i} - \frac{D_{i-1/2}(n_i - n_{i-1})}{h_{i-1}} \right)$$

Для слагаемого  $\frac{\partial}{\partial z}(nu)$  исследуем схемы направленных разностей  $\frac{u_{i+1}n_{i+1} - u_in_i}{h_i}$ ,

а также центральных разностей  $\frac{u_{i+1}n_{i+1} - u_{i-1}n_{i-1}}{h_{i-1} + h_{i+1}}$ .

Нижнее граничное условие (условие Дирихле) аппроксимируется точно, а на верхней границе условие постоянства потока может быть записано несколькими способами. Для данной одномерной задачи используем две различных аппроксимации этого условия:

- В первом случае поток  $\frac{\partial n}{\partial z} + \frac{u_N}{D_N} \cdot n_N = F$  аппроксимируется с помощью центральных разностей по пространству, что соответствует схеме

$$n_N - n_{N-1} + u_N/D_N \cdot h_N \cdot n_N = F \cdot h_N$$

- Во втором случае для схемы центральных разностей запишем согласованную схему для верхнего граничного случая, получаемую с помощью интегрирования уравнения на  $N$ -ом шаге по пространству между двумя соседними полуцелыми узлами, а также учёта равенства потока на верхнем полуцелом узле заданной величине  $F$ :

$$h_{N+1/2} \frac{n^{j+1} - n^j}{\tau} = F - D_{N-1/2} \frac{n_N - n_{N-1}}{h_{N-1}} - \frac{1}{2}(u_{N-1}n_{N-1}^{j+1} + u_N n_N^{j+1})$$

Соответственно, в численных экспериментах протестированы три различные разностные схемы:

- В схеме 1 потоковый член и граничное условие аппроксимируются с помощью центральных разностей;
- В схеме 2 только потоковый член в уравнении записывается с помощью центральных разностей, а граничное условие всё еще использует центральные разности;
- Наконец, схема 3 имеет согласованные граничное условие и схему, записанные с помощью центральных разностей.

Исследуемая задача имеет не зависящее от времени решение, а численные эксперименты показали, что при итерациях по времени происходит установление решения во всех трёх схемах. Используемый шаг по пространству  $h = 5$  км и по времени  $\tau = 3$  мин обеспечивает сходимость к одной и той же кривой в схемах 1 и 3 с характерным временем установления порядка 4 – 5 часов (по прошествии этого времени первые несколько значащих цифр в решении уже не изменяются). Схема 2 также имеет сходимость к стационарному решению, но в отличие от оставшихся двух схем при шаг по пространству  $h = 5$  км слишком велик, для получения того же самого решения, что и в других двух схемах, необходимо уменьшить шаг хотя бы до  $h = 0,2$  км.

Результаты расчетов (стационарные решения в зависимости от разного количества узлов по пространству) представлены на следующих графиках (по горизонтальной оси масштаб выбран логарифмическим). Соответственно, 80, 400 и 2000 узлов отвечают шагам по времени 5 км, 1 км и 0,2 км.

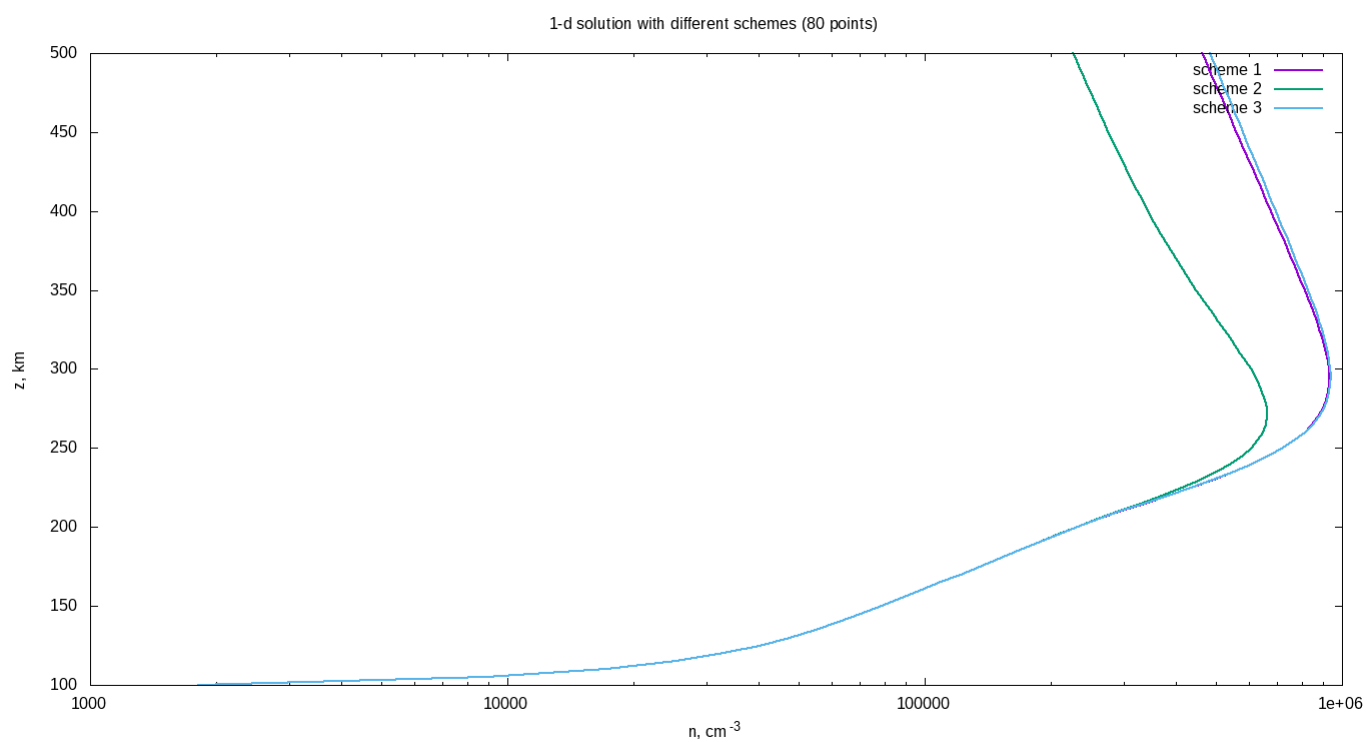


Рис. 1: Стационарные решения на 80 расчётных узлах.

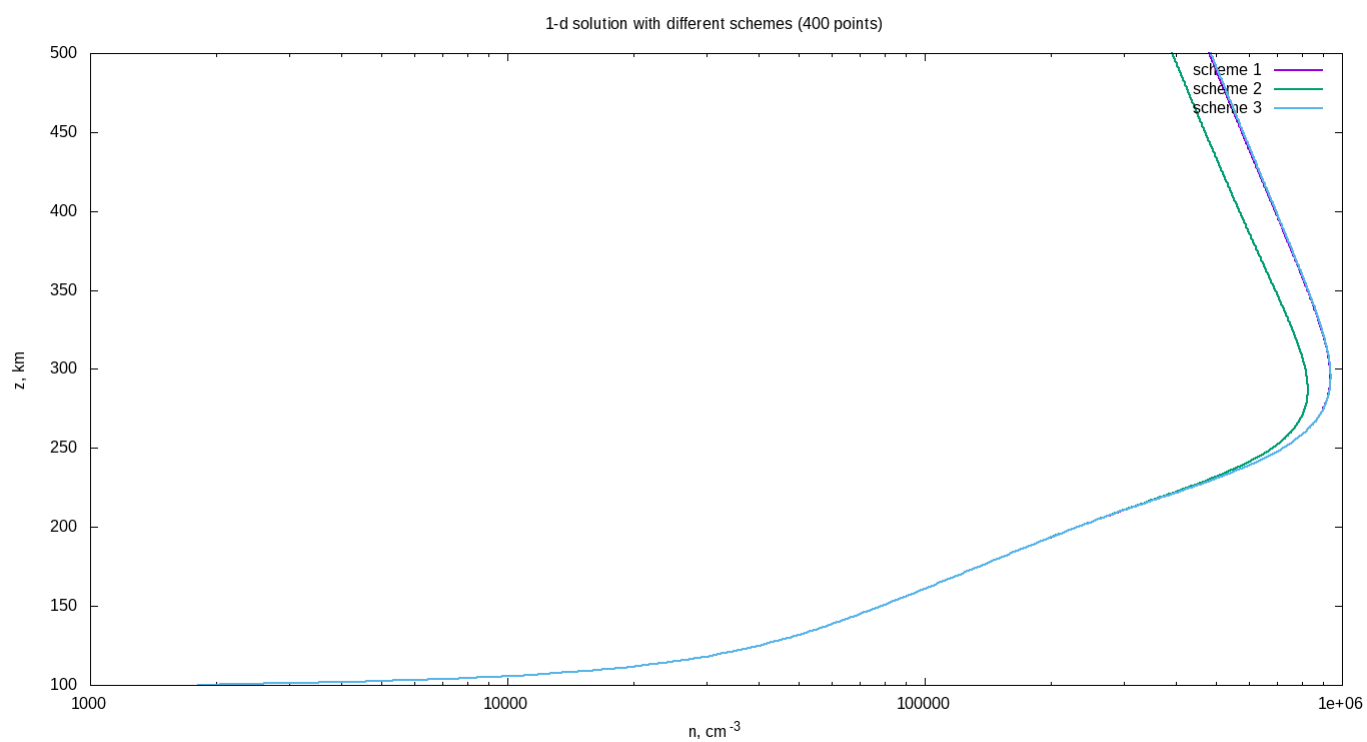


Рис. 2: Стационарные решения на 400 расчётных узлах.

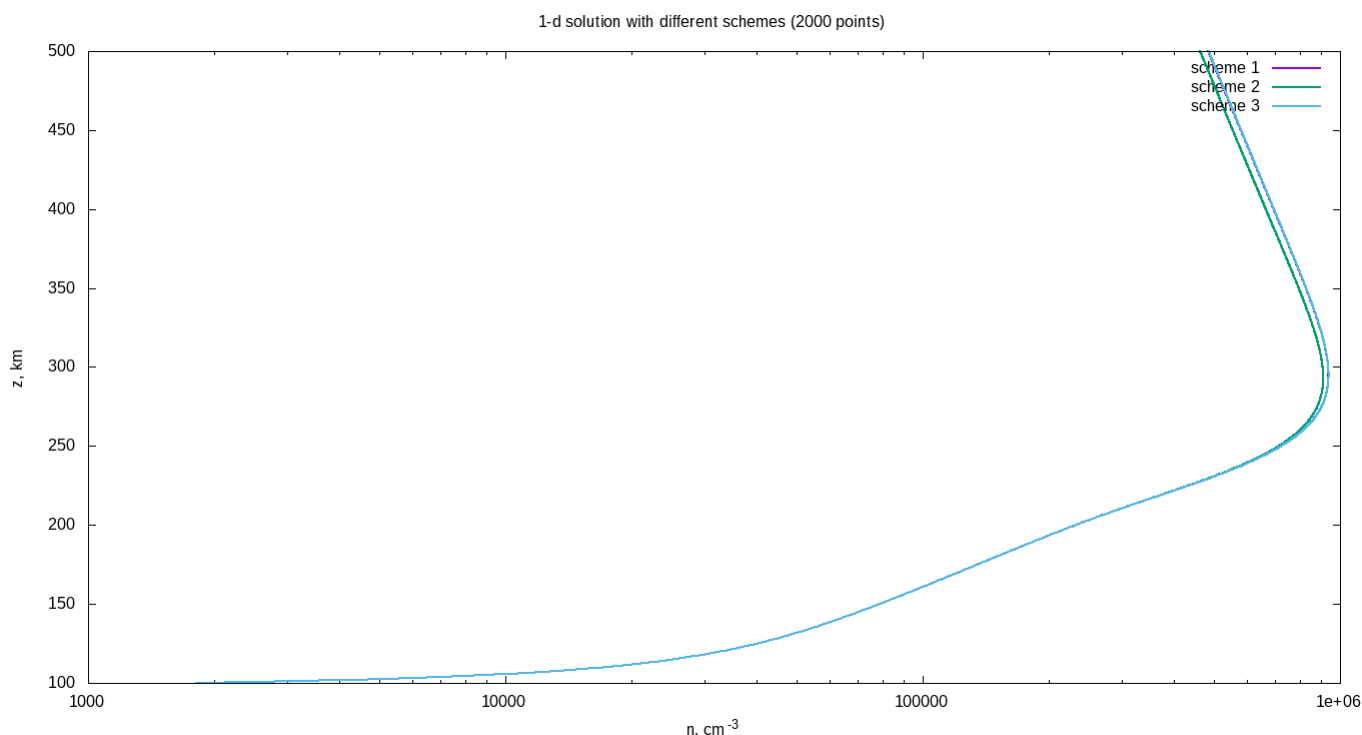


Рис. 3: Стационарные решения на 2000 расчётных узлах.

Полученное решение позволяет исследовать чувствительность к изменению различных входящих в уравнение внешних параметров: температурам, концентрациям нейтральных молекул, фотоионизации и рекомбинации. На следующих ниже графиках представлены результаты варьирования каждого из параметров в отдельности на 10% и 20% (в обе стороны). В каждом случае вычислено стационарное решение при изменённом параметре, на всех графиках средняя кривая отвечает невозмущенному уравнению.

Варьирование входящих в уравнение температур показывает, что наибольшую чувствительность решение имеет к температуре нейтральных молекул. Изменение концентрации нейтральных молекул — атомарного кислорода, молекулярного кислорода и азота показывает, что наибольшая чувствительность решения отвечает изменению концентрации атомарного кислорода, а чувствительности к изменению концентраций атомарного кислорода и азота приблизительно одинаковы.

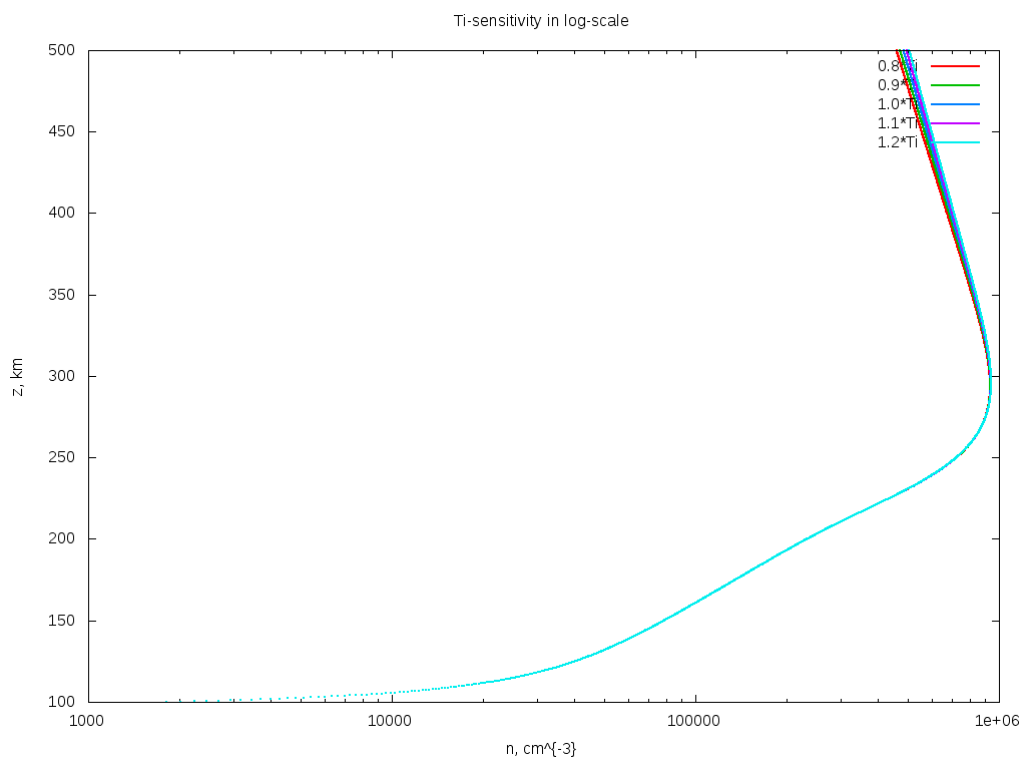


Рис. 4: Чувствительность к изменению температуры ионов.

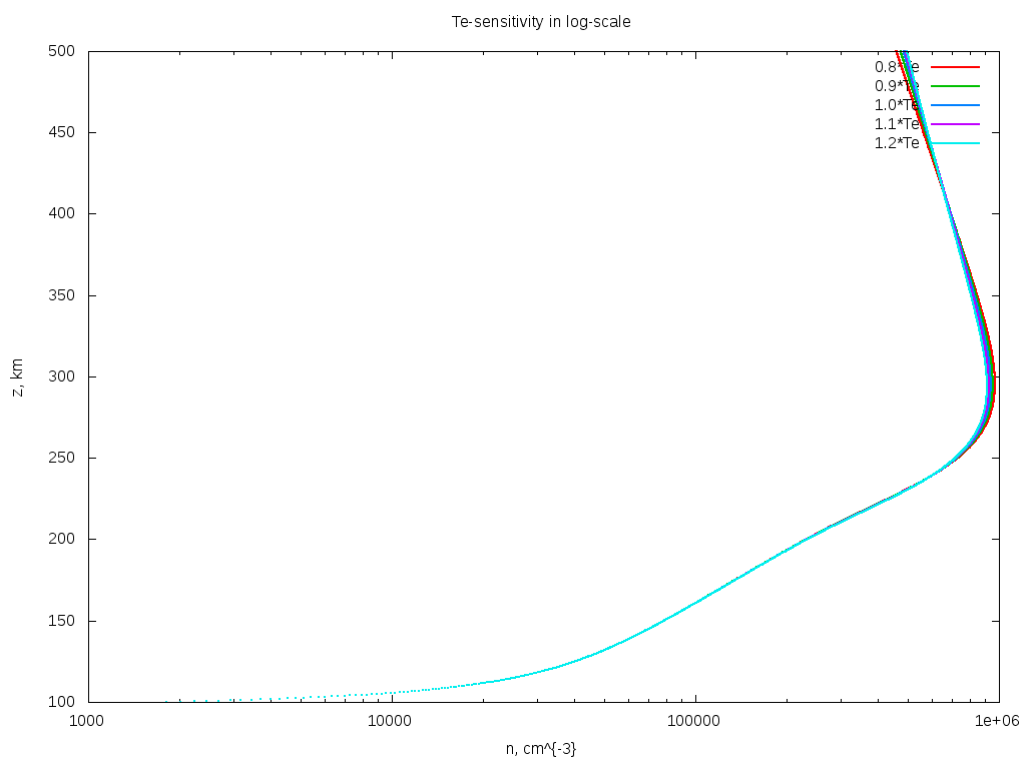


Рис. 5: Чувствительность к изменению температуры электронов.

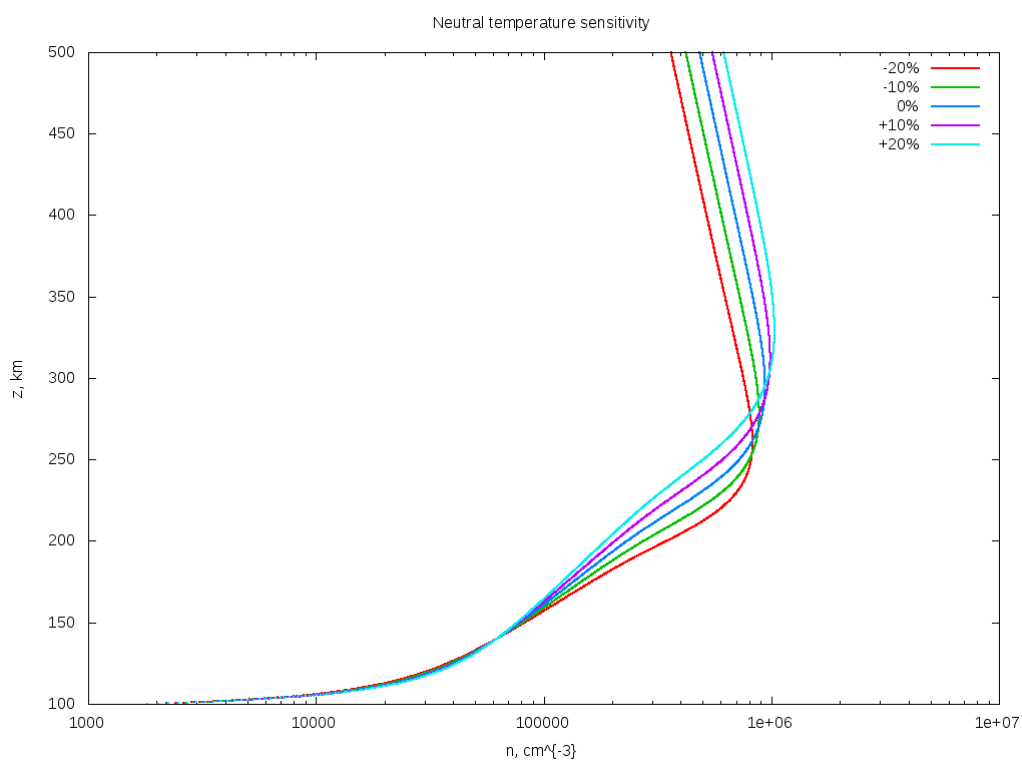


Рис. 6: Чувствительность к изменению температуры нейтральных молекул.

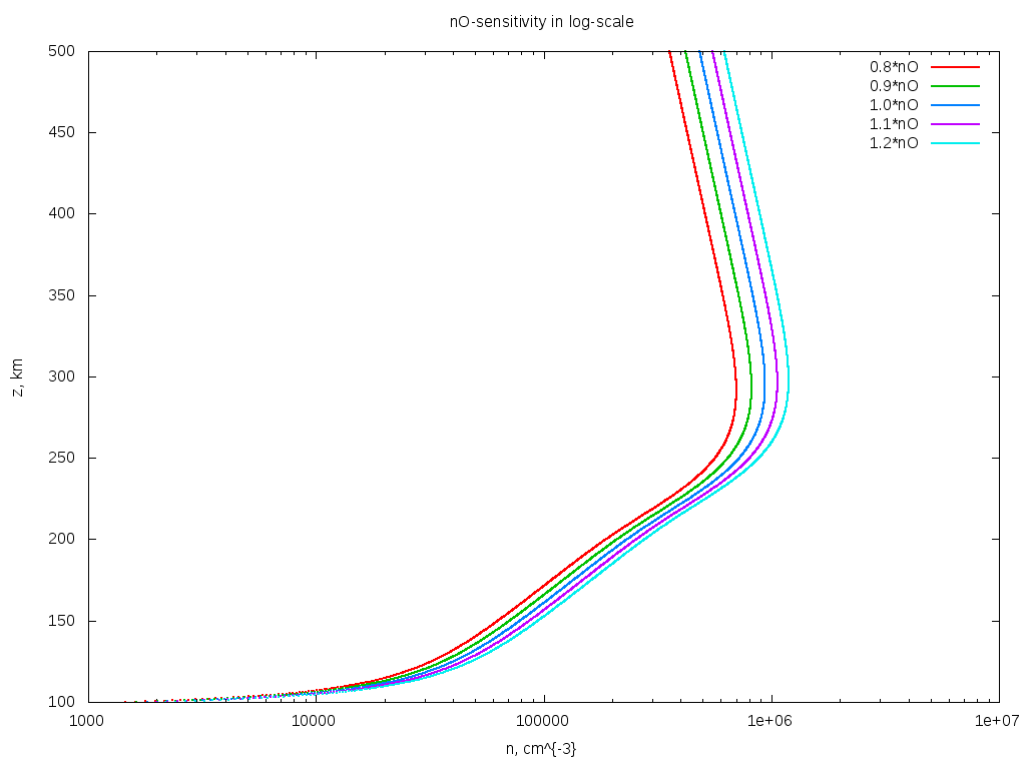


Рис. 7: Чувствительность к изменению концентрации атомарного кислорода.

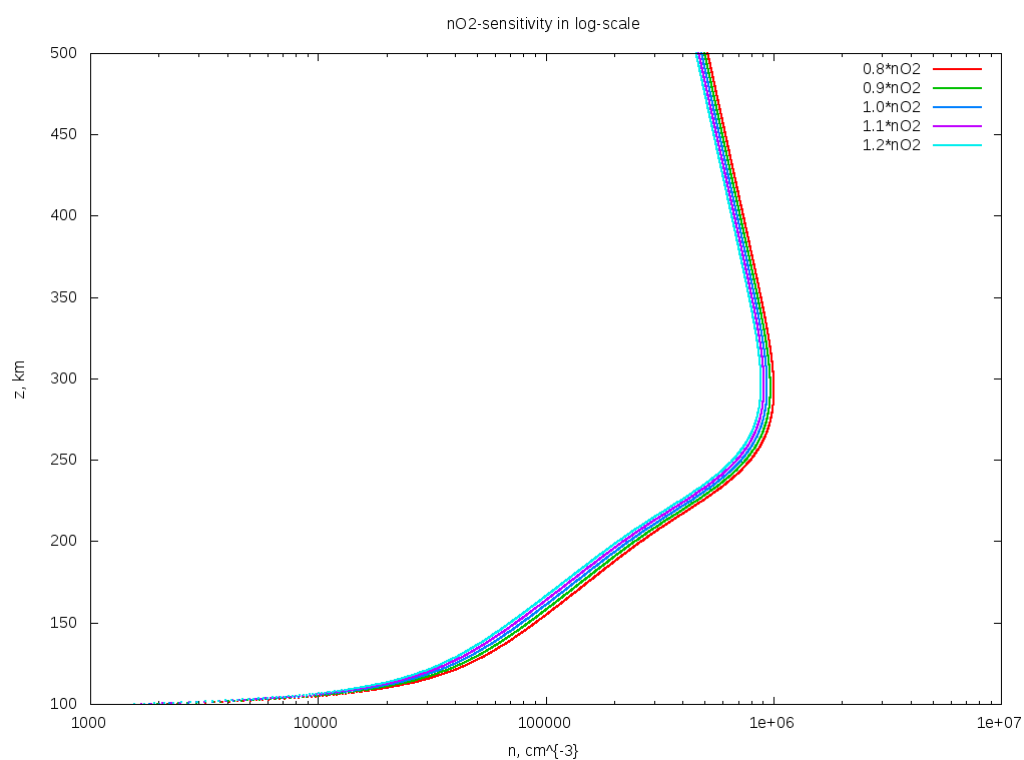


Рис. 8: Чувствительность к изменению концентрации молекулярного кислорода.

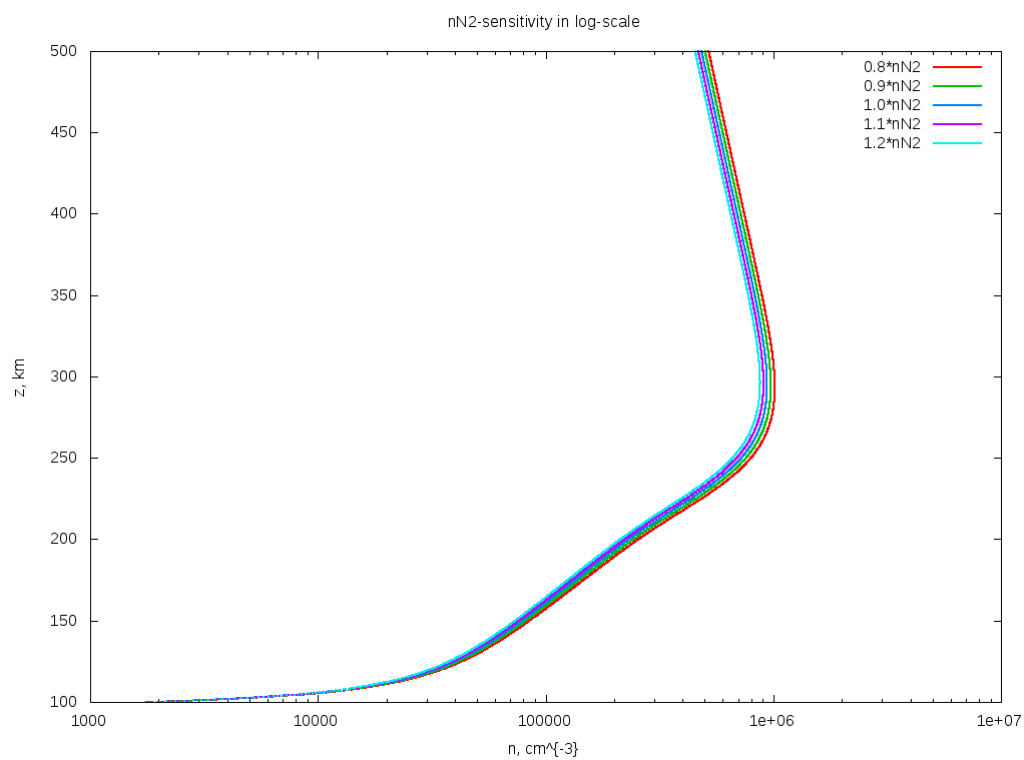


Рис. 9: Чувствительность к изменению концентрации азота.



## Суточный ход

Полученное в предыдущем разделе стационарное решение отвечает по существу состоянию системы в один определённый момент времени, а вертикальный профиль соответствует фиксированным широте и долготе. Для моделирования суточного изменения вертикального профиля добавим зависимость от времени в слагаемое  $P$ , отвечающее фотоионизации.

Используем формулу

$$P(z, t) = \begin{cases} P_0(z) e^{\tau_0(z)(1-\sec \chi)}, & |\chi| \leq \frac{\pi}{2} \\ 0, & |\chi| \geq \frac{\pi}{2} \end{cases}$$

Здесь использованы следующие обозначения:  $P_0(z)$  — фотоионизация, использованная в одномерной модели,  $\chi$  — зенитный угол Солнца (угол между направлением на Солнце и нормалью к земной поверхности),  $\tau_0(z)$  — оптическая толщина, для вычисления которой используется формула

$$\tau_0(z) = \sum_{i=N_2, O_2, O} \sigma_i^{abs} \left[ \frac{R_0 T_n}{M_i g} n_i(z) \right] = \frac{R_0 T_n}{g} \left( \sigma_{N_2}^{abs} \frac{n_{N_2}(z)}{M_{N_2}} + \sigma_{O_2}^{abs} \frac{n_{O_2}(z)}{M_{O_2}} + \sigma_O^{abs} \frac{n_O(z)}{M_O} \right).$$

Константы  $\sigma_i^{abs}$  для трёх типов нейтральных молекул известны и равны соответственно  $\sigma_{N_2}^{abs} = 1,5 \cdot 10^{-17} \text{ см}^2$ ,  $\sigma_{O_2}^{abs} = 2 \cdot 10^{-17} \text{ см}^2$ ,  $\sigma_O^{abs} = 1 \cdot 10^{-17} \text{ см}^2$ .

Характерные величины оптической толщины на различных высотах представлены в следующей таблице:

	$z_1 = 100 \text{ км}$	$z_2 = 300 \text{ км}$	$z_3 = 500 \text{ км}$
$\tau_0$	$4 \cdot 10^2$	$3 \cdot 10^{-1}$	$2 \cdot 10^{-4}$

[Здесь необходимо добавить комментарии по поводу физического смысла формулы для  $\tau_0$ ]

В предложенной формуле для фотоионизации время в качестве параметра входит лишь в зенитный угол. Кусочное задание функции  $P(z, t)$  связано с приближением отсутствия фотоионизации в ночное время (Солнце не заходит за горизонт лишь при зенитных углах, не превосходящих  $90^\circ$ ).

Зависимость зенитного угла от времени даётся следующими формулами:

$$\cos \chi = \sin \varphi \cdot \sin \delta - \cos \varphi \cdot \cos \delta \cdot \cos \omega t$$

Здесь  $\omega$  — угловая скорость вращения Земли,  $\varphi$  — широта, а  $\delta$  — склонение Солнца, тангенс которого определяется формулой

$$\operatorname{tg} \delta = \operatorname{tg} 23,5^\circ \cdot \sin \left( 2\pi \cdot \frac{d - 80}{365} \right),$$

где  $d$  — номер дня от начала года.

В ходе численного эксперимента по моделированию суточного хода в одномерной модели вычисляется стационарное решение одномерной задачи при дневном значении  $P(z)$ , а затем итерации по времени продолжаются с уже меняющимся  $P(z, t)$  в соответствии со введённой формулой.

Результаты представлены следующим графиком — трёхмерной поверхностью, построенной над плоскостью  $(z, t)$ :

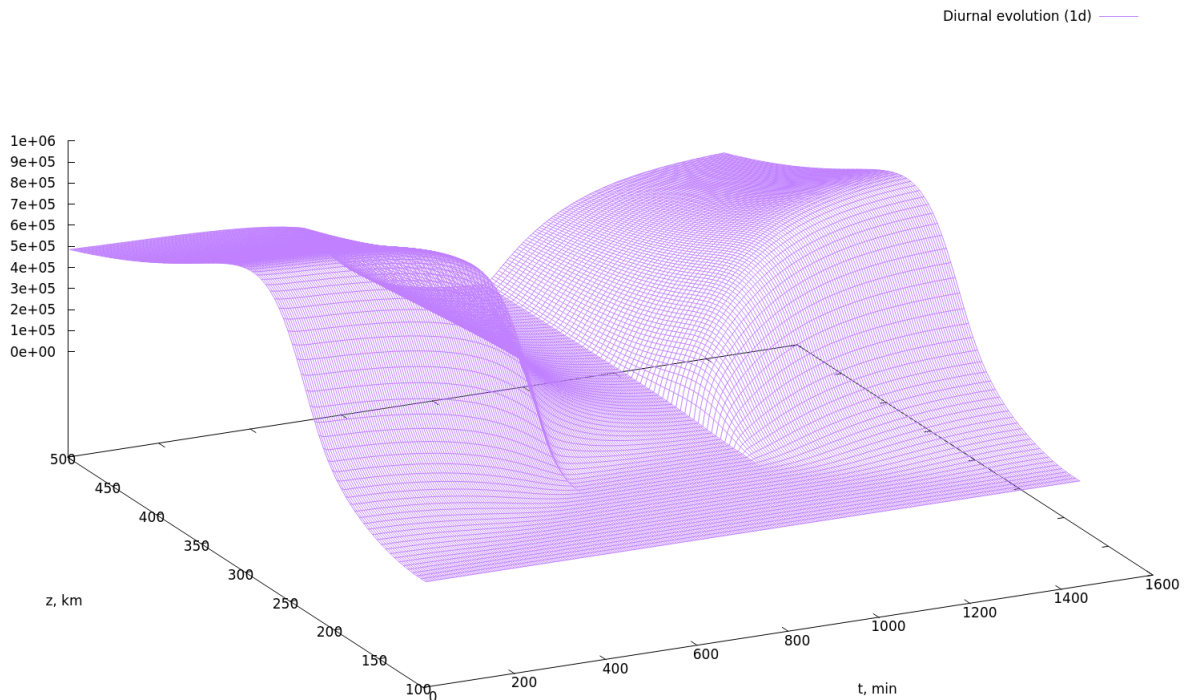


Рис. 10: Суточный ход в одномерной модели с добавлением зависимости фотоионизации от зенитного угла.

Видно, что за сутки решение восстанавливается. Кроме того, после зануления  $P$  при зенитных углах больше  $90^\circ$  начинается спад электронной концентрации, сопровождающийся изломом по времени (в соответствующий момент  $P$ , входящее в уравнение, также терпит излом).

Отметим также, что при обнулении  $P$  решение (начиная со стационарного) падает почти до нуля приблизительно за 6 часов.

## **Квазидвумерные обобщения**