

Рис.1. Елементарний об'єм (центр - точка розміщення датчика).

#### Нехай

 $\Delta t$  - нескінченно малий проміжок часу,

 $V_{x}$  - складова середньої швидкості адвективного переносу вздовж осі X,

 $V_{y}$  - складова середньої швидкості адвективного переносу вздовж осі Y,

 $V_z$  - складова середньої швидкості адвективного переносу вздовж осі Z,

*q* - концентрація субстанції.





Кількість першого інгредієнта  $\Delta Q_{\rm \tiny gH}$ , що вноситься адвективним потоком в елементарний об'єм  $\Delta V$ 

$$\Delta Q_{\scriptscriptstyle \!\mathit{BH}} =$$

$$\Delta Q_{\rm eh} = V_{\rm x} \Delta t \Delta y \Delta z q \mid_{\rm x};$$

Кількість інгредієнта  $\Delta Q_{\text{вин}}$  , що виноситься адвективним потоком з об'єму  $\Delta V$ 

$$\Delta Q_{\text{вин}} = V_x \Delta t \Delta y \Delta z q \mid_{x+\Delta x}$$
.

В елементарному об'ємі  $\Delta V$  накопичується кількість першого інгредієнта

$$\Delta Q_x = \Delta t \Delta y$$

$$\Delta t \Delta y \Delta z (V_x q \mid_x -V_x q \mid_{x+\Delta x}) \approx$$

$$\approx -\frac{\partial (V_x q)}{\partial x} \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t = -\frac{\partial (V_x q)}{\partial x} \Delta V \Delta t$$





Аналогічно вздовж осей Ү і Z :

$$\Delta Q_{y} = -\frac{\partial (V_{y}q)}{\partial y} \Delta V \Delta t; \Delta Q_{z} = -\frac{\partial (V_{z}q)}{\partial z} \Delta V \Delta t.$$
 (2)

Загальна кількість домішок в елементарному об'ємі

$$\Delta Q_a = -\left(V_x \frac{\partial q}{\partial x} + V_y \frac{\partial q}{\partial y} + V_z \frac{\partial q}{\partial z}\right) \Delta V \Delta t,$$

Вхідний та вихідний потік, викликаний молекулярною дифузією вздовж осі X за час  $\Delta t$ 

$$\Delta Q_{_{\mathit{BH}}}^{'} = -D \frac{\partial q}{\partial x} |_{_{X}} \Delta t \Delta y \Delta z,$$

$$\Delta Q_{\text{вин}}' = -D \frac{\partial q}{\partial x} |_{x+\Delta x} \Delta t \Delta y \Delta z,$$

D - коефіцієнт молекулярної дифузії.





Вміст першого інгредієнта в  $\Delta V$  внаслідок молекулярної дифузії вздовж осі X

$$\Delta Q_{x}' = \left(-D\frac{\partial q}{\partial x}\big|_{x+\Delta x} + D\frac{\partial q}{\partial x}\big|_{x}\right) \Delta y \Delta z \Delta t =$$

$$= -\frac{\partial}{\partial x} D\frac{\partial q}{\partial x} \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t = -D\frac{\partial^{2} q}{\partial x^{2}} \Delta V \Delta t.$$

вздовж осей Ү і Z:

$$\Delta Q_{y}^{'} = -D \frac{\partial^{2} q}{\partial y^{2}} \Delta V \Delta t; \Delta Q_{z}^{'} = -D \frac{\partial^{2} q}{\partial z^{2}} \Delta V \Delta t.$$

Загальна кількість домішок в елементарному об'ємі, накопичена за час  $\Delta t$  в результаті адвективного переносу і молекулярної дифузії, складе:

$$\Delta Q = -\left(V_x \frac{\partial q}{\partial x} + V_y \frac{\partial q}{\partial y} + V_z \frac{\partial q}{\partial z} + D\left(\frac{\partial^2 q}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 q}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 q}{\partial z^2}\right)\right) \Delta V \Delta t.$$





Очевидно, що

$$\frac{\Delta Q}{\Delta V} = \Delta q$$

$$\frac{\Delta q}{\Delta t}\big|_{\Delta t \to 0} = \frac{\partial q}{\partial t}$$

Враховуючи наявність турбулентної дифузії  $(K_x, K_y, K_z - \text{складові коефіцієнта турбулентного обміну})$ 

$$\frac{\partial q}{\partial t} = -\left(V_x \frac{\partial q}{\partial x} + V_y \frac{\partial q}{\partial y} + V_z \frac{\partial q}{\partial z}\right) + \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x + D\right) \frac{\partial q}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y + D\right) \frac{\partial q}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z + D\right) \frac{\partial q}{\partial z}\right],$$





Методика, розроблена Ейлером передбачає, що потік повітря в момент часу t характеризується полем швидкостей  $\overline{v}(\overline{r},t)$ , тобто значеннями складових вектора швидкості у всеможливих точках r=(x,y,z) прямокутного декартового простору.

Для вивчення явища турбулентної дифузії (тобто поширення домішок в турбулентному потоці) більш зручним є метод Лагранжа, згідно з яким замість швидкостей  $\overline{v}(\overline{r},t)$  в точках г пропонується використовувати траєкторії руху окремих достатньо малих елементів об'єму повітря.





Нехай домішка входить в потік у вигляді газоподібної добавки чи великої кількості дрібних твердих речовин і характеризується ейлеровим полем об'ємної концентрації q(t, x, y, z).

Розглянемо явище переносу при відсутності дифузії.

Концентрація домішок в елементі об'єму повітря залишається постійною,

$$dq/dt = 0, (3)$$

ЧИ

$$\frac{\partial q}{\partial t} + v_x \frac{\partial q}{\partial x} + v_y \frac{\partial q}{\partial y} + v_z \frac{\partial q}{\partial z} = 0,$$
(4)





Відомо, що для нижнього шару атмосфери в термінах  $\overline{v} = (v_x, v_y, v_z)$  виконується рівняння нерозривності:

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0,$$
(5)

ЧИ

$$div\overline{v} = 0$$

Враховуючи (5), одержимо:

$$div\overline{v}q = v_x \frac{\partial q}{\partial x} + v_y \frac{\partial q}{\partial y} + v_z \frac{\partial q}{\partial z} + qdiv\overline{v}$$

$$= v_x \frac{\partial q}{\partial x} + v_y \frac{\partial q}{\partial y} + v_z \frac{\partial q}{\partial z}$$





Тоді рівняння (4) перепишеться у вигляді:

$$\frac{\partial q}{\partial t} + div\overline{v}q = 0. ag{6}$$

Надалі вважатимемо, що

- ✓ умова (5) завжди виконується,
- $\checkmark$   $v_3 = 0$  при z = 0 і z = H.

Рівняння (6) можна узагальнити. Якщо в процесі переносу домішки частина її осідає чи перестає існувати, то рівняння (6) набуде вигляду

$$\partial q/\partial t + div\overline{v}q + \sigma q = 0. (7)$$

де  $\sigma \ge 0$  – величина, пропорційна відносній швидкості самостійного зменшення концентрації домішки.





Якщо в деякій точці  $r_0 = (x_0, y_0, z_0)$  розташоване джерело домішок, інтенсивність і розташування якого описується функцією f(x, y, z, t), наприклад

 $f(x, y, z, t) = Q\delta(\overline{r} - \overline{r_0})$ , де  $\delta(\overline{r} - \overline{r_0}) - \delta$  – функція, що задовольняє умові:

$$\int_{G} \varphi(\overline{r}) \delta(\overline{r} - \overline{r_0}) dr = \begin{cases} \varphi(\overline{r_0}), \overline{r_0} \in G, \\ 0, \overline{r_0} \notin G, \end{cases}$$

рівняння переносу при наявності джерела домішок має вигляд:

$$dq/dt + div\overline{v}q + \sigma q = f. ag{8}$$





Нехай рівняння (8) задано в області G тривимірного декартового простору з боковою циліндричною поверхнею S і основами z = 0, z = H.

Додамо до рівняння (8) початкові і граничні умови:

$$q = q_0 \text{ при } t = t_0, \tag{9}$$

$$q = q_s$$
 на S при  $v_n < 0$ , (10)

де  $q_0$  і  $q_s$  — задані функції;  $v_n$  — проекція вектора  $\overline{v}$  на зовнішню нормаль до бокової поверхні S.





#### Фізика флуктуаційних ефектів.

Найпростіша теорія, що дозволяє враховувати флуктуаційні ефекти, передбачає подання функції q у вигляді суми усередненої  $\overline{q}$  і флуктуаційної q' компонент, тобто  $q=\overline{q}+q'$ , при цьому q' достатньо швидко змінюється з часом і є малою величиною в порівнянні з  $\overline{q}$ .

**Флуктуації** – механізми збурення, змін, які виводять явище, систему із рівноваги і переводять її на інший рівень функціонування.

Рівняння для середніх значень концентрації домішок має вигляд:

$$\frac{\partial q}{\partial t} + div\overline{v}q + \sigma q = \frac{\partial}{\partial z}v\frac{\partial q}{\partial z} + \mu\Delta q + f,$$
(11)

де  $\Delta$  – оператор Лапласа;

 $\nu, \mu \ge 0$  — горизонтальний і вертикальний коефіцієнти дифузії відповідно;





початкові і граничні умови

$$q = q_s$$
 на  $S$  при  $v_n < 0$ , (12)

$$\partial q/\partial z = \alpha q$$
 при  $z = 0$ ;  $\partial q/\partial z = 0$  при  $z = z_H$  - (13)

#### Деякі часткові випадки

Розглянемо дифузійну постановку задачі -  $\overline{v} \equiv 0$ 

$$\sigma q = \mu d^2 q / dx^2 + Q \delta(x - x_0) \tag{14}$$

 $-\infty < x < \infty$ ,

Q – потужність джерела викидів домішки, розташованого в точці  $x = x_0$ .

В якості граничних умов будемо використовувати умову обмеженості розв'язку в усій області, в якості функції джерела  $f = Q\delta(x - x_0)$ , де  $Q \ge 0$  – константа.





У випадку наявності n джерел, розміщених в точках  $x_1, x_2, ..., x_n$ , функція f має такий вигляд:

$$f = \sum_{i=1}^{n} Q_i \delta(x - x_i),$$

де  $Q_i \ge 0$  – потужність i – го джерела.

Якщо інтенсивність викиду є функцією часу, f набуде вигляду:

$$f = \sum_{i=1}^{n} Q_i(t) \delta(x - x_i).$$

Для задачі з рухомим джерелом слід використовувати функцію

$$f = \sum_{i=1}^{n} Q_i(t) \delta(x - x_i(t)).$$





Наведемо задачу (14) до еквівалентної форми, що не містить  $\delta$  – функції. Для цього проінтегруємо рівняння в  $\varepsilon$  – околі точки  $x_0$ :

$$\sigma \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} q dx = \mu \frac{\partial q}{\partial x} \Big|_{x_0+\varepsilon} - \mu \frac{\partial q}{\partial x} \Big|_{x_0-\varepsilon} + Q.$$

Скориставшись властивістю  $\delta$  – функції,  $\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} \delta(x-x_0) dx = 1$ , спрямувавши  $\varepsilon$ 

до нуля, одержимо:

$$\mu \frac{\partial q}{\partial x} \Big|_{x_0 + \varepsilon} - \mu \frac{\partial q}{\partial x} \Big|_{x_0 - \varepsilon} + Q = 0.$$
 (15)





Розглянемо дві області  $-\infty < x \le x_0, x_0 \le x < \infty$  і відповідні їм розв'язки позначимо  $q_-$  і  $q_+$ , тобто будемо розглядати дві задачі:

$$\mu d^2 q_+ / dx^2 - \sigma q_+ = 0, \quad q_+ = 0 \text{ при } x \to +\infty;$$
 (16)

$$\mu d^2 q_-/dx^2 - \sigma q_- = 0$$
,  $q_- = 0$  при  $x \to -\infty$ . (17)

При  $x = x_0$  розв'язки задач (16), (17) зв'язані співвідношенням (15).

Припускаючи, що розв'язок задачі неперервний в усіх точках, включаючи  $x = x_0$ , одержимо:

$$q_{+} = q_{-}$$
 при  $x = x_{0}$ . (18)





Розв'язки задач мають вигляд:

$$q_{+} = C_{+} \exp \left[-\sqrt{\sigma}/\mu(x - x_{0})\right],$$

$$q_{-} = C_{-} \exp \left[-\sqrt{\sigma}/\mu(x_{0} - x)\right]$$

Підставляючи ці розв'язки в (15) і (18), одержуємо  $C_{+} = C_{-} = Q/(2\sqrt{\sigma\mu})$ .

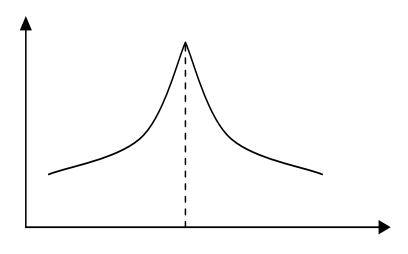
Остаточно розв'язок задачі (14) запишемо у вигляді:

$$q(x) = \frac{Q}{2\sqrt{\sigma\mu}} \begin{cases} \exp\left[-\sqrt{\sigma}/\mu(x-x_0)\right], & x \ge x_0, \\ -\sqrt{\sigma}/\mu(x_0-x)\right], & x < x_0. \end{cases}$$

В результаті дифузії одержується розв'язок, який експоненціально і симетрично зменшується в обидва напрямки від точки  $x = x_0$ .







Puc. 2 Аналітичний розв'язок спрощеної задачі (v=0).





Розглянемо більш складну ситуацію, коли швидкість потоку повітря v відрізняється від нуля, тобто поширення домішок описується рівнянням

$$v dq/dx + \sigma q = \mu d^2 q/dx^2 + Q\delta(x - x_0),$$

$$v > 0$$
,  $-\infty < x < +\infty$ .

Аналогічно попередньому випадку одержимо дві задачі:

$$\mu d^2 q_+ / dx^2 - v dq_+ / dx - \sigma q_+ = 0, \quad q_+ = 0 \text{ при } x \to +\infty;$$
 (19)

$$\mu d^2 q_-/dx^2 - v dq_-/dx - \sigma q_- = 0$$
,  $q_- = 0$  при  $x \to -\infty$ . (20)





Розв'язки задач (19), (20) можна представити у вигляді:

$$q_{+} = C_{+} \exp \left\{ -\left[ (\sigma/\mu + v^{2}/(4\mu^{2}))^{1/2} - v/(2\mu) (x - x_{0}) \right], x \ge x_{0},$$

$$q_{-} = C_{-} \exp \left\{ -\left[ (\sigma/\mu + v^{2}/(4\mu^{2}))^{1/2} - v/(2\mu) (x_{0} - x) \right], x < x_{0}.$$
(21),(22)

Підставляючи (21), (22) в (15) і в (18), одержуємо  $C_+ = C_- = Q/(4\sigma\mu + v^2)^{1/2}$ .

В підсумку розв'язок задачі буде мати вигляд:

$$q(x) = \frac{Q}{(4\sigma\mu + v^2)^{1/2}} \left\{ \exp \left\{ -\left[\sigma/\mu + v^2/(4\mu^2)\right]^{1/2} (x - x_0) \right\} x \ge x_0, \\ \left[\sigma/\mu + v^2/(4\mu^2)\right]^{1/2} (x_0 - x) \right\} x < x_0.$$





В загальному випадку задача прогнозування забруднення може бути визначена як розв'язок диференціального рівняння:

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \sum_{i=1}^{3} U_i \frac{\partial q}{\partial x_i} = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial q}{\partial x_i} k_i \frac{\partial q}{\partial x_i} - \alpha q,$$
(23)

де t – час;

 $\bar{x} = (x_1, x_2, x_3) \in \Omega, \Omega \in \mathbb{R}^3$  – просторова область;

 $q(t,\bar{x})$  – концентрація домішки в точці;

 $\overline{U}(U_1, U_2, U_3)$  – вектор швидкості вітру;

k – тензор коефіцієнтів турбулентної дифузії;

 $\alpha$  – інтенсивність поглинання домішки;

при певних початкових і граничних умовах





В декартовій системі координат осі  $x_1$  і  $x_2$ , розташовані в горизонтальній плошині, позначають через x і y, а вертикальну вісь  $x_3$  – через z; відповідно  $U_1=u,U_2=v,U_3=w$  і  $k_1\equiv k_x,k_2\equiv k_y,k_3\equiv k_z$ .

При розв'язуванні практичних задач вигляд рівняння (23) може спрощуватись

якщо вісь x орієнтована за напрямком середньої швидкості вітру, то v=0;

якщо вертикальний рух в атмосфері над горизонтальною однорідною підстилаючою поверхнею малий, то у випадку легких домішок можна покладати w=0;





якщо ж розглядається важка домішка, то  $w \in \text{швидкістю}$  осідання входить в рівняння зі знаком "мінус";

при наявності вітру можна знехтувати членом з  $k_x$ , що враховує дифузію по осі x .

За періоди часу, які можна порівняти з часом переносу домішок від джерела до розглядуваної точки, процес дифузії стабілізується (Марчук, 1982).

Таким чином, вихідне прогностичне рівняння (23) зводиться до рівняння:

$$u\frac{\partial q}{\partial x} - w\frac{\partial q}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z}k_z\frac{\partial q}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial y}k_y\frac{\partial q}{\partial y} - \alpha q.$$
 (24)





При наявності точкового джерела з координатами x = 0, y = 0, z = H гранична умова матиме вигляд:

$$uq = Q\delta(y)\delta(z-H)$$
 при  $x = 0$ ,

де Q – викид речовин від джерела за одиницю часу;  $\delta(\xi)$  – дельта-функція. Граничні умови .

- $\checkmark$  на нескінченній віддалі від джерела беруться згідно з природнім припущенням про те, що концентрація прямує до нуля:  $q \to 0$  при  $|y|, |z| \to \infty$ .
- $\checkmark$  коли домішки поширюються над поверхнею води, вона поглинає домішки, тому їх концентрація безпосередньо біля поверхні: q=0 при z=0.
- ✓ з поверхнею землі домішки зазвичай слабко взаємодіють, тому середній турбулентний потік домішки біля поверхні землі достатньо малий

$$k_z \frac{\partial q}{\partial z} = 0$$
 при  $z = 0$ .





#### Інтегровані прогностичні рівняння (за Берляндом).

Використання залежності, запропонованої Берляндом (1963):  $k_y = k_0 u$ , дозволяє спростити інтегрування вихідного рівняння (24), виразивши розв'язок для випадку точкового джерела q(x,y,z) через розв'язок для лінійного джерела q'(x,z) за допомогою співвідношення:

$$q(x,y,z) = \frac{q'(x,z)}{(2\pi k_0 x)^{(1/2)}} \exp(-y^2) / (4k_0 x),$$
 (25)

де q' задовільняє рівняння:

$$u\frac{\partial q'}{\partial x} - w\frac{\partial q'}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z}k_z\frac{\partial q'}{\partial z} - \alpha q', \qquad (26)$$

і початкову умову:

$$uq' = Q\delta(z-H)$$
 при  $x = 0$ .





У випадку, коли u і  $k_z$  задані степеневими функціями від z, розв'язок рівняння (26) знаходиться аналітично.

Для легкої домішки, що зберігається ( $w = \alpha = 0$ ), при

$$u = u_1 z^n, k_z = k_1 z, (u_1, k_1 = const)$$

з врахуванням (25), згідно робіт Берлянда (1963,1975), наземна концентрація при z=0:

$$q = \frac{Q}{2(1+n)k_1(2\pi k_0 x)^{(1/2)}} \exp\left[-\left(u_1 H^{1+n}\right)/\left((1+n)^2 k_1 x\right) - y^2/(4k_0 x)\right]$$

Якщо відомі очікувані значення швидкості вітру, показника стійкості атмосфери і потужності викиду, то можна дати прогноз концентрації домішки.





#### Метод скінченних різниць.

Визначення похідної неперервної функції q аргументу z

$$\frac{dq(z)}{dz} = \lim_{\Delta z \to 0} \frac{q(z + \Delta z) - q(z)}{\Delta z} = \lim_{\Delta z \to 0} \frac{q(z) - q(z - \Delta z)}{\Delta z}.$$

$$\lim_{\Delta z \to 0} \frac{q(z + \Delta z) - q(z)}{\Delta z} \approx \frac{q_{j+1} - q_j}{z_{j+1} - z_j}.$$

Таблиця 1. Прості скінченно -різницеві формули для похідних.

Похідна	Формула	Порядок точності
$\frac{\partial q}{\partial z}$	$q_{j+1}-q_{j}$	Перший (різницевий вперед)
$\partial z$	$\Delta z$	
	$q_j - q_{j-1}$	Перший (різницевий назад)
	$\Delta z$	
	$q_{j+1} - q_{j-1}$	Другий (центральні різниці)
	$\Delta z$	
$\frac{\partial^2 q}{\partial z^2}$	$q_{j+1} - 2q_j + q_{j-1}$	Другий (центральні різниці)
$\overline{\partial z^2}$	$\Delta z^2$	





#### Метод скінченних елементів у формі методу Гальоркіна.

Нехай  $W^{\infty}$  — гільбертів простір функцій, визначених на  $\Omega \times [0,T]$ ,  $(\cdot,\cdot)$  — скалярний добуток на  $W^{\infty}$ ,  $W^{N}$  — скінченновимірний підпростір  $W^{N} \subset W^{\infty}$ .

Нехай  $q^* \in W^{\infty}$  — шуканий точний розв'язок диференціальної задачі (23).

Для будь-якої функції  $q \in W^{\infty}, q \neq q^{*}$ , нев'язкою рівняння

$$A \cdot q - f = 0, \tag{27}$$

$$A[\cdot] = \left\{ \frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^{3} \left[ u_i \frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( k_i \frac{\partial}{\partial x_i} \right) \right] + \alpha \right\} [\cdot]; \ f(\bar{x}, t) - \text{функція правої частини,}$$

назвемо величину

$$e = A \cdot q - f$$
.





Зрозуміло, що

$$e^* = A \cdot q^* - f = 0.$$

Введемо бази в просторах  $W^{\infty}$  і  $W^{N}$  так, щоб орти бази підпростору  $W^{N}$   $\{W_{n}(\overline{x},t)\}_{n=0}^{N}$  були частиною бази простору  $W^{\infty}$   $\{W_{n}(\overline{x},t)\}_{n=0}^{\infty}$ . Наближений розв'язок рівняння (23) будемо шукати як функцію  $\widetilde{q} \in W^{N}$ :

$$\widetilde{q} = \sum_{n=0}^{N} \widetilde{q}_n W_n(\overline{x}, t), \tag{28}$$

де  $\widetilde{q}_n$  – коефіцієнти розкладу  $\overline{q}$  за базі  $\{W_n\}_{n=0}^N$ .





Задача пошуку наближеного розв'язку  $\overline{q}$  тоді зводиться до визначення таких коефіцієнтів  $\tilde{q}_n$ , які надають мінімум невязці  $\tilde{e} = A * \overline{q} - f$  в значенні норми  $|\tilde{e}| = (\tilde{e}, \tilde{e})$ . У відповідності з нерівністю Коші-Буняковського функція  $\tilde{e}$  дістає мінімальне по нормі значення , якщо наближений розвязок  $\tilde{q}_n$  є проекцією точного розвязку  $q^*$  на підпростір  $W^N$ . В цьому випадку нев'язка перпендикулярна ортам бази підпростору  $W^N$ 

$$(A * \tilde{q} - f, w_n) = 0, n = 0, ..., N.$$
 (29)

Оскільки  $\tilde{q}$  у відповідності з (28) визначається коефіцієнтами  $\tilde{q}_{n}, n=0,...,N$ , то система (29) є системою (N+1) рівнянь з (N+1) невідомими, з яких визначаються коефіцієнти  $\tilde{q}_{n}, n=0,...,N$ . Тоді функція (28) з обчисленими значеннями коефіцієнтів є розв'язком рівняння (27), який визначений методом Гальоркіна.