2. ~~Oro kokybės~~ Atmosferos taršos modeliavimas I

2.1. Įvadas. Oro kokybė įgauna vis didesnę socialinę svarbą. Rūgštūs lietūs, sąlygojami pramonės šalutinių produktų – nuodingų dujų yra ištisų regionų didelė problema: jie užteršia dirvožemį ir kenkia augalijai. Miestų teritorijose didelė ozono koncentracija, kaip manoma, yra didelis sveikatingumo rizikos faktorius. ~~Oro kokybės~~ Atmosferos taršos modeliai yra kenksmingų medžiagų pernešimo, difuzijos ir cheminių reakcijų atmosferoje matematinis aprašymas. Nežinomos funkcijos juose yra cheminių medžiagų koncentracija ~~ore~~. Tokių modelių kūrimas ir nagrinėjimas turi tikslą prognozuoti didžiausių koncentracijų kitimą atsižvelgiant į meteorologinių sąlygų ir taršos šaltinių intensyvumo kitimą. Ozono priemaišų sklidimo modeliavimas pastaruosius 20 metų yra viena svarbiausių aplinkos apsaugos tyrimo sričių Jungtinėse Valstijose: tai ypatingai svarbu automobilių pramonei.

Šioje paskaitoje kalbėsime apie vieno chemikalo, tarkime, ozono pernešimą bei difuziją ir ignoruosime kitus su tuo susijusius reiškinius.

Pateiksime šią problemą, pasiremdami konkrečiu pavyzdžiu: tegul stebime gamyklą, išskiriančią nuodingus dūmus. ~~Sakykime~~ Tarkime, kartą per valandą, (~~Kai~~ Taip yra ~~sąlygoje~~ gamybinis procesas), gamykla kelių minučių bėgyje išskiria labai koncentruotą teršalų pliūpsnį. Kilometro atstumu nuo gamyklos kamino yra gražus namas, kurį norėtumėte pirkti. Jei vėjas pūs tiesiai namo kryptimi („blogiausia" iš galimų krypčių), tai kiek ~~[illegible]~~ žalingi bus dūmai, kurie po kurio laiko pasieks „jūsų" namą? Kitais žodžiais tariant, kokia bus maksimali dūmų, pasiekiančių jūsų namą, koncentracija?

Jei tarsime, kad dūmų kelyje neegzistuoja cheminiai ~~[illegible]~~ polycijai, tai svarbiausi liks du procesai: advekcija ir difuzija.

Advekcija yra iš esmės ~~[illegible]~~ dūmų kamuolio pernešimas duotąja kryptimi, ~~pl~~ pučiant vėjui, kada dūmų kamuolio forma pastebimai nesikeičia.

Nagrinėsime pradžioje vienmatį atvejį, kada veikia advekcija, bet nėra difuzijos.

Tarkime, pradinio laiko momentu dūmų koncentracija turi pasiskirstymo profilį $c_0(x)$

Tegul šis profilis juda į dešinę, pučiant vėjui, kurio greitis yra u, ir tuo būdu gauname koncentracijos profilio kitimą laike ir erdvėje

(1) $$c(x,t) = c_0(x-ut)$$

Naudodami grandininę taisyklę diferencijuojame pagal x ir t, ir gauname

$$\frac{\partial c}{\partial x}(x,t) = c_0'(x-Ut)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t}(x,t) = c_0'(x-Ut)\cdot(-U)$$

Iš čia gauname „advekcijos lygtį"

$$(2) \qquad \frac{\partial c(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial(U c(x,t))}{\partial x} = 0$$

su pradine sąlyga $c(x,0) = c_0(x)$.

Čia aprašytoje situacijoje šio pradinio uždavinio sprendinį žinome iš anksto. Tačiau bendresniu atveju, kai vėjo greitis U nėra konstanta, tai nėra įmanoma.

Stebėdami dūmų debesies koncentracijos formą $c(x,t) = c_0(x-Ut)$, matome kad ~~koncentracija~~ dūmai pasiekę mūsų ~~ter~~ namą tokios pat koncentracijos, kaip ir gamyklos teritorijoje, taigi koncentracija bus labai aukšta.

Tačiau kitas procesas – difuzija – leidžia tikėti, kad ne viskas taip blogai. Difuzija sąlygoja koncentracijos maksimumo mažėjimą, todėl advekcijos ir difuzijos procesų sąveika ~~[illegible]~~ žymia dalimi apsprendžia tikrąjį padėtį.

2.2. Modelis

Pažymėsime raide c vienos medžiagos koncentraciją; ji yra erdvės taško (x_1, x_2, x_3) ir laiko t funkcija. Medžiagą ~~ya~~ perneša vėjas, kurio greitis $\vec{u} = \vec{u}(x_1, x_2, x_3, t)$, laikysim, yra žinomas. Medžiagos dalelės taip pat lokaliai difunduoja: jos iš didesnės koncentracijos sričių juda į ~~mažos~~ tas sritis, kuriose koncentracija yra mažesnė. Jeigu nekreipsime dėmesio į difuziją, tai turėsime pernešimo (advekcijos, dreifo) lygtį

$$(3) \qquad \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla(\vec{u}\cdot c) = 0 \qquad \left[\ \frac{\partial c}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{u}\cdot c) = 0\right.$$

Ši lygtis taip pat kartais yra vadinama tolydumo lygtimi. Jeigu (3) lygtį ~~per~~ suintegruosime pagal aprėžtą sritį $D \subset R^3$, gausime

$$(4) \qquad \frac{d}{dt}\iiint_D c(x_1, x_2, x_3, t)\,dx_1\,dx_2\,dx_3 = -\iint_{\partial D} c\,\vec{u}\cdot\vec{n}\,dS,$$

kur ∂D yra srities D kraštas, o $\vec{n}$ – paviršiaus ∂D išorinė normalė. (Čia pasinaudojome Gauso–Ostrogradskio teorema). Ši lygtis reiškia, kad chemikalo koncentracijos didėjimo (mažėjimo) greitis bet kurioje srityje D yra lygus chemikalo srautui per srities kraštą. Atvirkščiai, jei (4) lygybė yra teisinga bet kuriai sričiai D, tai mažindami sritį iki 0, gausime (3) lygtį.

Jeigu neignoruosime difuzijos, tada vietoj (3) gausime sudėtingesnę dalinių išvestinių lygtį:

$$(5) \qquad \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla(\vec{u}\cdot c) = \sum_{i,j=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_i}\left(k_{ij}\frac{\partial c}{\partial x_j}\right),$$

kur (k_{ij}) yra teigiamai apibrėžta matrica, vadinama difuzijos matrica (tenzoriumi).

Bet kuriuo atveju, (3) ar (5), pradiniu laiko momentu, sakykime $t=0$, užduodame koncentraciją

$$(6) \qquad c(x_1,x_2,x_3,0)=c_0(x_1,x_2,x_3)$$

ir keliame sau uždavinį rasti koncentracijos reikšmes tolesniais laiko momentais. Dažnai keliame ~~aktualus~~ uždavinį ~~?~~ rasti maksimalias koncentracijos duotu laiko momentu (ir duotoje vietoje); valstybinė taršos kontrolė dažniausiai vadovaujasi maksimalia koncentracijos reikšme, kaip svarbiausiu ~~faktoriumi~~ rodikliu.

2.3. Advekcijos lygties sprendimas charakteristikų metodu

Tarkime, kad nėra difuzijos, o vėjas pučia tiktai viena iš horizontalių krypčių, sakysim, x ašies kryptimi. Tada $\vec{u}=(U,0,0)$, ir pernešimo lygtis tampa

$$(7) \qquad \frac{\partial c}{\partial t}+\frac{\partial (U c)}{\partial x}=0$$

Leiskime, kad pradiniu laiko momentu c priklauso tik nuo x, t.y.,

$$(8) \qquad c(x,0)=c_0(x), \qquad -\infty<x<\infty$$

Taip pat leisime, kad greitis $U=U(x)$ yra x funkcija.

Tam, kad išspręsti (7), (8) uždavinį, leisime, kad $U(x)$ – tolydžiai diferencijuojama ir perrašykime (7) lygtį pavidalu

$$(9) \qquad \frac{\partial c}{\partial t}+U\frac{\partial c}{\partial x}=f \qquad (f=-U_x c),$$

~~ir leisime, kad U(x)~~

Nagrinėsime diferencialinę lygtį

$$(10)\quad \begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = u(x) & t > 0 \\ x(0) = x_0 \end{cases}$$

ir paimkime jos sprendinį $x(t) = x(t; x_0)$.
Geometriškai $x(t; x_0)$ apibrėžia vienintelę kreivę γ_{x_0}, einančią per tašką $(x_0, 0)$.

Imkime funkciją $c(x(t, x_0), t)$, kaip kintamojo t funkciją. Tada

$$\frac{dc}{dt} = \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial c}{\partial x} \cdot \frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = f = -u_x(x(t, x_0)) \cdot c$$

arba

$$\cancel{\frac{d}{dt} \lg c} \quad \frac{d}{dt} \ln c = -u_x(x(t; x_0))$$

Iš čia išplaukia, kad

$$(11)\quad c(x(t; x_0), t) = c_0(x_0)\, e^{-\int_0^t u_x(x(s; x_0))\,ds}$$

Pastebėsime, kad $\frac{d}{dt}$ yra diferencijavimas išilgai kreivės γ_{x_0}, parametrizuotos parametru t.

Taigi (7), (8) uždavinio sprendinys yra išreikštas ~~duodamas~~ (11) formule. Atvirkščiai, galima įrodyti, kad jei kreivės $(x(t; x_0), t)$ padengia viršutinę (x, t) pusplokštumę $(t \geq 0)$, tai (11) lygybės dešinioji pusė yra (7), (8) sprendinys.

Apibrėžimas. (10) lygtimi apibrėžiamos kreivės yra vadinamos charakteristikomis. ~~Sprend~~ Aukščiau išdėstytas sprendinio c radimo būdas yra vadinamas charakteristikų metodu.

2. 4. Skaitiniai metodai

Nepaisant to, kad (11) formule sprendinys yra labai gražiai išreiškiamas, ji nėra labai patogi oro užterštumo modeliavimui. Iš tikro, realioje ~~eksperimentinėje~~ situacijoje ~~~~ turime baigtinį skaičių oro stebėjimo stočių, sąlyginai, išdėstytų taškuose $X_1, X_2, \dots, X_N$ ir sprendžiame uždavinį apie koncentracijos c prognozavimą bet kuriame taške X_j laiko momentais $T_1, T_2 \dots$ Tam, kad apskaičiuoti c taške (X_j, T_k) naudojant (11) formulę, mes turėtume žinoti tašką x_0, per kurį pradinė charakteristika, jungianti taškus $(x_0^k, 0)$ su (X_j, T_k). Jei skaičiuojame c tolesniame laiko taške T_2, tai mums reikės atitinkamo naujo pradinio laiko x_0^2 ir t.t. Dideliems laikams T_N pradinio taško paieškos gali pareikalauti daug laiko.

Todėl praktikoje yra taikomas geresnis ~~skaičiavimo~~ skaitinis metodas – baigtinių skirtumų metodas. Jo esmė tokia.

Padaliname x intervalą į vienodo ilgio intervalus Δx, o teigiamąją t pusašį ~~lygiai~~ vienodais intervalais Δt. Norime aproksimuoti vertes $c(j\Delta x, n\Delta t)$ tam tikrais dydžiais c_j^n, tenkinančiais atitinkamą aproksimuojančią lygtį.

Paprastumo dėlei pirmiausiai išnagrinėsime atvejį, kai U nepriklauso nuo x, taigi, tuo atveju (7), (8) lygtys atrodo taip:

$$(12) \qquad \frac{\partial c}{\partial t} + U\frac{\partial c}{\partial x} = 0, \quad c(x,0) = c_0(x)$$

Tam, kad spręsti (12) uždavinį skaitiškai, išvestines lygtyje keičiame baigtiniais skirtumais. Sudarome skirtuminį tinklelį ω_{xt} (x,t) plokštumoje tokiu būdu: $\omega_{xt} = \{(x_j, t_n) : x_j = j\Delta x,\ t = n\Delta t,\ j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, n = 0, 1, 2, \dots\}$

Tikslią koncentracijos reikšmę taške (x_j, t_n) $C(j\Delta x, n\Delta t)$ aproksimuojantį dydį, kaip anksčiau sakėme, žymėsime c_j^n. (Šiuo atveju indeksas n reiškia ne laipsnio rodiklį). Išvestines aproksimuojame taip:

$$\frac{\partial c}{\partial t} \approx \frac{c(j\Delta x, (n+1)\Delta t) - c(j\Delta x, n\Delta t)}{\Delta t} \Longleftrightarrow \frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t}$$

$$\frac{\partial c}{\partial x} \approx \frac{c(j\Delta x, n\Delta t) - c((j-1)\Delta x, n\Delta t)}{\Delta x} \Longleftrightarrow \frac{c_j^n - c_{j-1}^n}{\Delta x}.$$

Tokiu atveju (12) diferencialinė lygtis yra pakeičiama

$$\frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t} + U\frac{c_j^n - c_{j-1}^n}{\Delta x} = 0$$

arba

$$(13) \qquad c_j^{n+1} = c_j^n - \frac{U\Delta t}{\Delta x}\left(c_j^n - c_{j-1}^n\right)$$

(13) formulę vadinama išreikštine skirtumine schema, kadangi c_j^{n+1} (nežinomas dydis) formule išreiškiamas per c_j^n ir c_{j-1}^n (žinomus dydžius). Skaičiavimai pradedami nuo $n=1$ (pirmojo sluoksnio), o nuliniame sluoksnyje ($n=0$) yra duota pradinė sąlyga $c_0(x)$.

Kyla du klausimai. Pirmas: jei Δx ir Δt yra pakankamai maži, ar dydžiai c_j^n aproksimuoja $c(j\Delta x, n\Delta t)$ tiksliai taškuose kokia nors prasme? Antras: jei Δx ir Δt fiksuoti, ar c_j^n lieka aprėžtas, kai $n\to\infty$ (tolygiai j atžvilgiu ar kokia nors kita prasme). Jei atsakymas į pirmąjį klausimą yra teigiamas, sakome, kad baigtinių skirtumų schema konverguoja. Jei atsakymas į antrąjį klausimą teigiamas, sakome, kad schema yra stabili. Pastebėsime, kad antrasis klausimas liečia vien tik skirtuminę schemą: kaip kinta ~~elgiasi~~ jos sprendinys, kai $n\to\infty$ – ar lieka aprėžtas ar neaprėžtai auga?

Galima pateikti tokią nepriecizią pagrindinės (Lakso, Filipovo) teoremos formuluotę: Jei pradinis uždavinys yra gerai sąlygotas, ir jeigu išvestinės tinkamu būdu yra pakeistos baigtiniais skirtumais, tai iš skirtuminės schemos stabilumo išplaukia jos konvergavimas.

Dydis

$$(14) \qquad \sigma = \frac{u\Delta t}{\Delta x}$$

(13) schemoje vaidina fundamentalų rolę. Galima įrodyti, kad kai $0<\sigma\leq 1$, tai (13) schema konverguoja. Jei $\sigma>1$, tai schema diverguoja, t.y., kai $\Delta x, \Delta t$ mažėja, tai schemos sprendinys smarkiai osciliuoja. Schema bus stabili, kai $0<\sigma\leq 1$ ir nestabili, kai $\sigma>1$.

1. Uždavinys. Tegul $c_0(x) = \begin{cases} 5, & \text{kai } |x|<1 \\ 0, & \text{kai } |x|>1 \end{cases}$

Apskaičiuoti c pagal (13) skirtuminę schemą tais atvejais, kada $u = 1, 5, 10, 20, 40$. Rasti maksimalią koncentraciją, kai $t=4$. Kaip ji priklauso nuo u?

2. Uždavinys. Tegul

$$c_0(x) = \begin{cases} \sin^2\pi(x+2), & \text{kai } -2<x<-1, \text{ arba } 1\leq x\leq 2 \\ 0, & \text{kitais atvejais.} \end{cases}$$

Tegul $u=1$. Apskaičiuoti $c(x,t)$ profilį laikams $t = 1, 2, 3, \ldots, 10$

3. Uždavinys. Tą patį padaryti, kai

$$c_0(x) = \begin{cases} \sin^2 x, & \text{kai } 0<x<\pi \\ 0 & \text{kitais atvejais} \end{cases}$$

Kai $u = u(x)$, tai išreikštinę skirtuminę schemą galima apibendrinti tokiu būdu:

$$(15)\quad c_j^{n+1} = c_j^n - \frac{u_j \Delta t}{\Delta x}\left(c_j^n - c_{j-1}^n\right) - \frac{\Delta t}{\Delta x}\left(u_j - u_{j-1}\right) c_j^n,$$

kur $u_j = u(j\Delta x)$

4 Uždavinys. Panaudoti schemą (15) (7), (8) ~~tipo~~ uždavinio sprendimui, kai c_0 yra toks pat, kaip 1 uždavinyje, o

$$u(x) = \begin{cases} 0, & x \le 0 \\ \dfrac{x^2}{1+x^2} & \text{kitais atvejais} \end{cases}$$

Kokie yra koncentracijos c profiliai, kai $t = 1, 2, 4, 10$?

Pastaba. Cheminių koncentracija visada yra neneigiamas dydis. Tai labai gerai matosi (11) formulėje: jei $c_0 \geq 0$, tai ir $c > 0$ visiems tolesniems laiko momentams. Tačiau ši sąlyga nebūtinai yra išlaikoma (13) schemoje. Tai yra, netgi kai $c_0 \geq 0$, gali būti taip, kad prie tam tikrų indeksų reikšmių n, i c_n^i tampa neigiamais. Žinoma, tais atvejais, kai schema konverguoja, artinant Δx ir Δt į 0, ~~tai gausim, kad~~ neigiamos reikšmės c_i^n turi artėti į 0.