

МЕХАНИКА

УДК 539.3

DOI: 10.31429/vestnik-17-1-1-30-41

МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССОВ
ДИФФУЗИИ – КОНВЕКЦИИ – РЕАКЦИИ В МНОГОСЛОЙНОМ
ПОЛУПРОСТРАНСТВЕ И СЦЕПЛЕННЫХ ПОЛУПРОСТРАНСТВАХСыромятников П. В., Кривошеева М. А., Лапина О. Н., Нестеренко А. Г.,
Никитин Ю. Г.MODELING OF NON-STATIONARY DIFFUSION PROCESSES – CONVECTIONS –
REACTIONS IN MULTI-LAYER HALF-SPACES AND CONNECTED HALF-SPACESP. V. Syromyatnikov^{1, 2}, M. A. Krivosheeva², O. N. Lapina², A. G. Nesterenko², Yu. G. Nikitin²¹ Federal Research Center Southern Scientific Center of the Russian Academy of Sciences,
Rostov-on-Don, 344006, Russia² Kuban State University, Krasnodar, 350040, Russia
e-mail: syromyatnikov_pv@mail.ru

Abstract. A matrix method is developed for constructing the Fourier-Laplace symbol of the Green's function for a multilayer half-space and linked half-spaces for three-dimensional non-stationary problems of turbulent diffusion. The sources of emission of impurities can be external or internal, the number of considered layers can be large. The method allows solving boundary-value convection-diffusion-decay problems not only for piecewise constant media, but also for gradient media, all parameters of which depend on the vertical coordinate by discretization with a small vertical step. The multilayer half-space model is a better physical model of the atmosphere than the multilayer packet of layers, since the decrease in concentration in the upper layers in the half-space is caused not by the introduction of special boundary conditions, but by the natural decrease of the solution at infinity for half-space.

It is shown that for a boundary value problem of the third kind for a homogeneous half-space in the non-stationary case, the occurrence of real poles is possible, as well as in the stationary case. For the case of the occurrence of real poles, a method for determining the correct integration contour for the Laplace transform is indicated.

The proposed method for the numerical inversion of three-dimensional Fourier-Laplace integrals based on standard algorithms for integrating rapidly oscillating functions is very effective, which allows us to solve not only direct, but also some inverse problems of turbulent diffusion.

The given example of the numerical solution of a three-dimensional non-stationary problem for two linked half-spaces can be considered as a model of impurity propagation at the boundary of the atmosphere and the ocean.

Keywords: 3D non-stationary turbulent diffusion-convection-decay, boundary value problems, multilayer half-space, Fourier and Laplace transforms, Green's function symbol, numerical integration.

Введение

Решение нестационарных краевых задач конвекции-диффузии обычно базируется на

методах конечных разностей или конечных элементов [1–3], теория которых применительно к проблемам экологии хорошо разви-

Сыромятников Павел Викторович, д-р физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник лаборатории математики и механики краснодарского отделения Южного научного центра РАН, профессор кафедры математического моделирования Кубанского государственного университета; e-mail: syromyatnikov_pv@mail.ru.

Кривошеева Маргарита Александровна, магистрант второго года обучения кафедры математического моделирования Кубанского государственного университета; e-mail: margarita.krivosheeva@gmail.com.

Лапина Ольга Николаевна, канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры вычислительных технологий Кубанского государственного университета; e-mail: olga_ln@mail.ru.

Нестеренко Александр Григорьевич, канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры физики информационных систем Кубанского государственного университета; e-mail: agnest@mail.ru.

Никитин Юрий Геннадиевич, канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры теоретической физики и компьютерных технологий Кубанского государственного университета; e-mail: yug@fpm.kubsu.ru.

Работа выполнена в рамках реализации Госзадания ЮНЦ РАН на 2020 г. (№ г.р. 01201354241) при частичной поддержке гранта РФФИ и администрации Краснодарского края (проект 19-41-230011 п_а).

та. Недостатком указанных методов является невозможность их корректного применения к полуограниченным или неограниченным областям. В тоже время для полуограниченного многослойного полупространства и пространства решение может быть относительно просто получено с помощью интегральных преобразований Фурье–Лапласа [4] и численного интегрирования. Следует отметить, что обращение указанных интегральных преобразований на основе теории вычетов, особенно в многомерных задачах, из-за громоздкости решений долгое время представляло собой серьезную техническую проблему, сильно ограничивающую практическую применимость подходов, основанных на интегральных преобразованиях. Развитие специальных алгоритмов для интегрирования сильно осциллирующих функций [5, 6] позволило существенно продвинуться в данном направлении.

Разрабатываемая в предложенной работе модель многослойного полупространства на взгляд авторов является физически более адекватной моделью полуограниченной атмосферы, чем пакет слоев [7], поскольку поведение концентрации ЗВ в верхних слоях в полупространстве обусловлено не введением специальных граничных условий, как это имеет место в случае пакета слоев, а естественным для полупространства убыванием решения на бесконечности.

Рассматриваемый алгоритм является комбинацией методов, полученных для пакета слоев [7] и однородного полупространства [8], и сочетает их основные достоинства — простоту и экономичность, возможность моделирования градиентных сред. В работе [8] было показано, что для стационарной задачи третьего рода для однородного полупространства возможно возникновение вещественных полюсов у символа Фурье функции Грина, что приводит к некоторой разновидности аномальной диффузии [1]. В предлагаемой работе продемонстрировано, что для аналогичной нестационарной задачи возникновение вещественных полюсов у символа Фурье–Лапласа функции Грина также возможно. В данном случае требуется алгоритм выбора корректного контура интегрирования при выполнении преобразования Лапласа, который также разработан. Хотя для общего случая неоднородного полупространства возможность возникновения вещественных полюсов не доказана, такую принципиальную возможность все же не следует упускать из виду.

Метод численного обращения интегралов Фурье–Лапласа, основанный на адаптивных алгоритмах интегрирования быстро осциллирующих функций математических библиотек [5, 6], позволяет эффективно решать не только прямые, но и некоторые обратные краевые задачи турбулентной диффузии [9].

Приведенная в качестве численного примера нестационарная задача для двух сцепленных полупространств может рассматриваться как простая модель взаимодействия вертикально неограниченных атмосферы и океана.

1. Постановка задачи и общая схема решения

Рассматриваемая среда представляет собой $N - 1$ диффузионных слоев $\{-\infty \leq x, y \leq +\infty\}$, z_1, \dots, z_N , $z_1 = 0$, $z_n < z_{n+1}$, $n = 1, 2, \dots, N - 1$, $N \geq 2$. Нумерация слоев начинается снизу. Самый верхний «слой» N соответствует полупространству, занимающему область $z \geq z_N$. Границе между слоями и полупространством соответствует $z = z_N$. Каждый слой и полупространство имеет свои, в общем случае различные, материальные константы $u^{(n)}$, $v^{(n)}$, $w^{(n)}$, $\sigma^{(n)}$, $\mu^{(n)}$, $\nu^{(n)}$. Для среднemasштабного приближения нестационарное уравнение турбулентной диффузии в однородной среде имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi^{(n)}}{\partial t} + u^{(n)} \frac{\partial \phi^{(n)}}{\partial x} + v^{(n)} \frac{\partial \phi^{(n)}}{\partial y} + w^{(n)} \frac{\partial \phi^{(n)}}{\partial z} + \\ + \sigma^{(n)} \phi^{(n)} - \mu^{(n)} \left(\frac{\partial^2 \phi^{(n)}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi^{(n)}}{\partial y^2} \right) - \\ - \nu^{(n)} \frac{\partial^2 \phi^{(n)}}{\partial z^2} = q^{(n)}. \end{aligned} \quad (1.1)$$

Здесь $\phi^{(n)}$ — концентрация вещества в слое $z_{n+1} \leq z \leq z_n$, t — время, $u^{(n)}$, $v^{(n)}$, $w^{(n)}$ — скорости конвекции в направлениях OX , OY , OZ соответственно, $\sigma^{(n)}$ — коэффициент поглощения, $\mu^{(n)}$, $\nu^{(n)}$ — коэффициенты горизонтальной и вертикальной диффузии соответственно, $q^{(n)}$ — функция источника, заданного в ограниченных областях $\Omega^{(n)}$ на внешней границе полупространства или границах пакета слоев $z = z_j$, $j = 1, \dots, N$. Потребуем, чтобы в полупространстве выполнялось условие убывания на бесконечности при $z \rightarrow +\infty$

$$\lim_{z \rightarrow +\infty} \phi^{(N)}(x, y, z) = 0. \quad (1.2)$$

Рассмотрим вначале стационарный вариант для однородного уравнения (1.1), когда $q_n = 0$. В этом случае зависимость от времени членов уравнения (1.1) отсутствует, $\partial\phi^{(n)}/\partial t \equiv 0$. Произведем двукратное преобразование Фурье по переменным x, y . Получим в образах Фурье $\Phi^{(n)} = F_{x,y}[\phi^{(n)}]$ следующее уравнение второго порядка

$$\nu^{(n)} \frac{\partial^2 \Phi^{(n)}}{\partial z^2} - w^{(n)} \frac{\partial \Phi^{(n)}}{\partial z} - \theta^{(n)} \Phi^{(n)} = 0, \quad (1.3)$$

$\theta^{(n)} = \mu^{(n)}(\alpha^2 + \beta^2) - i(\alpha u^{(n)} + \beta v^{(n)}) + \sigma^{(n)}$, где α, β – параметры преобразования Фурье по x и по y соответственно. В каждом слое искомая функция $\Phi^{(n)}$ представляется следующим образом

$$\Phi^{(n)} = t_1^{(n)} \exp(\lambda_1^{(n)} z) + t_2^{(n)} \exp(\lambda_2^{(n)} z),$$

$$n = \overline{1, N-1},$$

где $\lambda_j^{(n)}$ корни характеристического многочлена (1.3)

$$\lambda_{1,2}^{(n)} = \frac{w^{(n)} \pm \tau^{(n)}}{2\nu^{(n)}}, \quad (1.4)$$

$$\tau^{(n)} = \sqrt{(w^{(n)})^2 + 4\nu^{(n)}\theta^{(n)}},$$

а векторы $\mathbf{t}^{(n)} = (t_1^{(n)}, t_2^{(n)})^T$ подлежат определению из дополнительных условий. Вектор $\mathbf{t}^{(N)}$ для полупространства имеет вид $\mathbf{t}^{(N)} = (0, t_2^{(N)})^T$. В полупространстве $0 \leq z_N < z$ функция $\Phi^{(n)}$ ищется в виде

$$\Phi^{(N)} = t_2^{(N)} \exp(\lambda_2^{(N)} z), \quad \text{Re } \lambda_2^{(N)} < 0. \quad (1.5)$$

Условия на границах раздела слоев имеют разрывный вид. Задается скачок нормальных производных $\nu^{(n)} \frac{\partial \Phi^{(n)}(z)}{\partial z}$ на уровне $z = z_n$

$$-\nu^{(n-1)} \frac{\partial \Phi^{(n-1)}(z_n)}{\partial z} = -\nu^{(n)} \frac{\partial \Phi^{(n)}(z_n)}{\partial z} + q_n, \quad (1.6)$$

$$\Phi^{(n-1)}(z_n) = \Phi^{(n)}(z_n), \quad n = 2, \dots, N.$$

Система уравнений относительно векторов $\mathbf{t} = (\mathbf{t}^{(1)}, \mathbf{t}^{(2)}, \dots, \mathbf{t}^{(N-1)}, \mathbf{t}^{(N)})^T$ имеет блочно-диагональный вид

$$\mathbf{C}\mathbf{t} = \mathbf{b}, \quad (1.7)$$

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} \check{\mathbf{C}}_1^1 & & \dots & & \mathbf{0} \\ \mathbf{C}_2^1 & -\mathbf{C}_2^2 & & & \vdots \\ & & \ddots & & \\ \vdots & & & -\mathbf{C}_N^{N-1} & \vdots \\ \mathbf{0} & \dots & & \mathbf{C}_N^{N-1} & -\mathbf{C}_N^{RN} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{t} = \begin{pmatrix} t_1^{(1)} \\ t_2^{(1)} \\ \vdots \\ t_2^{(N-1)} \\ t_2^{(N)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{B}^{(j)} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}.$$

Векторы $-\mathbf{B}^{(j)} = (1, 0)^T$. Размерность матрицы \mathbf{C} (1.7) $(2N-1) \times (2N-1)$, где N – число слоев, лежащих под полупространством. Блочные матрицы \mathbf{C}_m^n , $n, m = 1, N$, входящие в матрицу системы \mathbf{C} , имеют вид

$$\mathbf{C}_m^n = \begin{pmatrix} \psi_1 & \psi_2 \\ \xi_1 & \xi_2 \end{pmatrix}, \quad (1.8)$$

$$\psi_j = \nu^{(n)} \lambda_j^{(n)} \exp(\lambda_j^{(n)} z_m), \quad \xi_j = \exp(\lambda_j^{(n)} z_m),$$

$$j = 1, 2.$$

Матрица $\check{\mathbf{C}}_1^1$ – верхняя половина матрицы \mathbf{C}_1^1 , \mathbf{C}_N^{RN} – правая половина матрицы \mathbf{C}_N^N .

Прямое решение системы уравнений (1.7) возможно при небольшом числе слоев, в противном случае гораздо более эффективным является рекуррентный алгоритм, описываемый ниже. Пусть

$$\mathbf{D}^{(n)} = (\mathbf{C}_{n+1}^n)^{-1} \mathbf{C}_{n+1}^{n+1}, \quad n = \overline{1, N-2}. \quad (1.9)$$

Обратные матрицы $(\mathbf{C}_j^{j-1})^{-1}$ могут быть получены явно

$$\begin{aligned} (\mathbf{C}_j^{j-1})^{-1} &= \frac{1}{\tau^{(j-1)}} \times \\ &\times \begin{pmatrix} e^{-\lambda_1^{(j-1)} z_j} & -\nu^{(j-1)} \lambda_2^{(j-1)} e^{-\lambda_1^{(j-1)} z_j} \\ -e^{-\lambda_2^{(j-1)} z_j} & \nu^{(j-1)} \lambda_1^{(j-1)} e^{-\lambda_2^{(j-1)} z_j} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1.10)$$

Матрицы $\mathbf{D}^{(n)}$, $n = \overline{1, N-2}$ также выражаются в явном виде

$$D_{11}^{(n)} = \frac{1}{\tau^{(n)}} (\nu^{(n+1)} \lambda_1^{(n+1)} - \nu^{(n)} \lambda_2^{(n)}) \times e^{(z_{n+1}(-\lambda_1^{(n)} + \lambda_1^{(n+1)}))},$$

$$D_{12}^{(n)} = \frac{1}{\tau^{(n)}} (\nu^{(n+1)} \lambda_2^{(n+1)} - \nu^{(n)} \lambda_2^{(n)}) \times \\ \times e^{(z_{n+1}(-\lambda_1^{(n)} + \lambda_2^{(n+1)}))},$$

$$D_{21}^{(n)} = \frac{1}{\tau^{(n)}} (-\nu^{(n+1)} \lambda_1^{(n+1)} + \nu^{(n)} \lambda_1^{(n)}) \times \\ \times e^{(z_{n+1}(-\lambda_2^{(n)} + \lambda_1^{(n+1)}))},$$

$$D_{22}^{(n)} = \frac{1}{\tau^{(n)}} (-\nu^{(n+1)} \lambda_2^{(n+1)} + \nu^{(n)} \lambda_1^{(n)}) \times \\ \times e^{(z_{n+1}(-\lambda_2^{(n)} + \lambda_2^{(n+1)}))}.$$

Размерность матрицы $\mathbf{D}^{(N-1)} - (2 \times 1)$

$$\mathbf{D}^{(N-1)} = \left(\mathbf{C}_N^{N-1} \right)^{-1} \mathbf{C}_N^{RN}. \quad (1.11)$$

Рекуррентные соотношения для векторов $\mathbf{t}^{(n)}$ выглядят следующим образом:

$$\mathbf{t}^{(1)} = \mathbf{D}^{(1)} \mathbf{t}^{(2)}, \quad \mathbf{t}^{(2)} = \mathbf{D}^{(2)} \mathbf{t}^{(3)}, \dots,$$

$$\mathbf{t}^{(j-1)} = \mathbf{D}^{(j-1)} \mathbf{t}^{(j)} + \\ + (\mathbf{C}^{(j-1)}(z_j))^{-1} \mathbf{B}^{(j)}, \dots, \quad (1.12) \\ \mathbf{t}^{(N-1)} = \mathbf{D}^{(N-1)} \mathbf{t}^{(N)}.$$

Тогда

$$\mathbf{t}^{(1)} = \mathbf{D}^{(1)} \dots \mathbf{D}^{(N-1)} \mathbf{t}^{(N)} + \mathbf{D}^{(1)} \dots \\ \dots \mathbf{D}^{(j-2)} (\mathbf{C}^{(j-1)}(z_j))^{-1} \mathbf{B}^{(j)}.$$

Произведение $\mathbf{V}^{(j)} = (\mathbf{C}_j^{j-1})^{-1} \mathbf{B}^{(j)}$ выражается явно

$$\mathbf{V}^{(j)} = \frac{1}{\tau^{(j-1)}} \left\| \begin{array}{c} \exp(-\lambda_1^{(j-1)} z_j) \\ -\exp(-\lambda_2^{(j-1)} z_j) \end{array} \right\|. \quad (1.13)$$

Обозначим $\tilde{\mathbf{D}}^{(N-1)} = \mathbf{D}^{(1)} \dots \mathbf{D}^{(N-1)}$, тогда

$$\mathbf{t}^{(1)} = \tilde{\mathbf{D}}^{(N-1)} \mathbf{t}^{(N)} + \tilde{\mathbf{D}}^{(j-2)} \mathbf{V}^{(j)}. \quad (1.14)$$

Матрица $\check{\mathbf{C}}_1^1 \tilde{\mathbf{D}}^{(N-1)}$ является одномерной, поэтому обратная матрица

$$\mathbf{M} = \left(\check{\mathbf{C}}_1^1 \tilde{\mathbf{D}}^{(N-1)} \right)^{-1} = \\ = \frac{1}{\check{\mathbf{C}}_1^1 \tilde{\mathbf{D}}^{(N-1)}} = M, \quad (1.15)$$

также является одномерной, т.е. скалярной величиной. Теперь

$$t^{(N)} = t_2^{(N)} = MR^{(j)} = \frac{R^{(j)}}{\check{\mathbf{C}}_1^1 \tilde{\mathbf{D}}^{(N-1)}}. \quad (1.16)$$

Векторы $\mathbf{t}^{(n)}$ имеют вид

$$\mathbf{t}^{(n)} = \mathbf{D}^{(n)} \dots \mathbf{D}^{(N-1)} MR^{(j)} + \mathbf{D}^{(n)} \dots \\ \dots \mathbf{D}^{(j-2)} \mathbf{V}^{(j)}, \quad (1.17)$$

$$n \leq j - 2,$$

$$\mathbf{t}^{(n)} = \mathbf{D}^{(n)} \dots \mathbf{D}^{(N-1)} MR^{(j)} + \mathbf{V}^{(j)},$$

$$n = j - 1,$$

$$\mathbf{t}^{(n)} = \mathbf{D}^{(n)} \dots \mathbf{D}^{(N-1)} MR^{(j)},$$

$$j \leq n \leq N - 1,$$

$$t_2^{(N)} = MR^{(j)},$$

$$R^{(j)} = -\check{\mathbf{C}}_1^1 \tilde{\mathbf{D}}^{(j-2)} \mathbf{V}^{(j)}, \quad j \geq 2. \quad (1.18)$$

Если источник $Q^{(j)} = Q^{(1)}$ задан на нижней поверхности $z = z_1 = 0$, то $R^{(1)} = 1$. Если задана только одна нагрузка $Q^{(1)}$, формулы (1.17) описывают многослойное полупространство с источником, расположенным на внешней границе.

Окончательно символ вектор-функции Грина $\mathbf{K}^{(n)} = \mathbf{K}^{(n,j)}$ для многослойного полупространства с внутренним источником, заданным в плоскости $z = z_j$, имеет вид в слоях

$$K^{(n,j)} = t_1^{(n,j)} \exp(\lambda_1^{(n)} z) + \\ + t_2^{(n,j)} \exp(\lambda_2^{(n)} z), \quad (1.19)$$

$$z_n \leq z \leq z_{n+1}, \quad n = \overline{1, N-1}.$$

Для полупространства положим $\operatorname{Re} \lambda_1^{(N)} > 0$, $\operatorname{Re} \lambda_2^{(N)} < 0$, тогда

$$K^{(N,j)} = t_2^{(N,j)} \exp(\lambda_2^{(N)} z), \quad (1.20) \\ z_N \leq z \leq +\infty.$$

Заметим, что в стационарном случае для полупространства не всегда без дополнительных мер можно построить убывающее в бесконечности решение [8].

В общем случае наличия N источников, часть из которых может быть нулевыми, имеем представление

$$\begin{aligned} \Phi^{(n)}(\alpha, \beta, z) &= \\ &= \sum_{j=1}^N K^{(n,j)}(\alpha, \beta, z) Q^{(j)}(\alpha, \beta). \end{aligned} \quad (1.21)$$

При наличии только одного источника $Q^{(j)}$ имеем

$$\begin{aligned} \Phi^{(n)}(\alpha, \beta, z) &= \\ &= K^{(n,j)}(\alpha, \beta, z) Q^{(j)}(\alpha, \beta). \end{aligned} \quad (1.22)$$

2. Нестационарный источник

Если функция $\phi(t)$ непрерывна всюду, кроме, быть может, конечного числа точек разрыва первого рода, и, кроме того, существуют постоянные $M > 0$ и $\xi_0 > 0$, такие, что $|\phi(t)| < M \exp(\xi_0 t)$ для всех t , то существует интеграл

$$\bar{\phi}(p) = \frac{1}{2\pi i} \int_0^{\infty} \phi(t) \exp(-pt) dt = L[\phi], \quad (2.1)$$

при всех p , для которых $\operatorname{Re} p > \xi_0$ [4]. В полуплоскости $\operatorname{Re} p > \xi_0$ функция $\phi = L[\bar{\phi}]$ является аналитической и называется преобразованием Лапласа функции $\phi(t)$. Оригинал функции $\phi(t)$ по известному образу Лапласа $\bar{\phi}(p)$ может быть определен с помощью обратного преобразования Лапласа [4]

$$\phi(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \bar{\phi}(p) \exp(pt) dp = L^{-1}[\bar{\phi}].$$

Здесь γ выбирается таким, что в комплексной плоскости p контур интегрирования лежит правее всех особых точек $\bar{\phi}(p)$. Принимая все начальные условия нулевыми, после применения к уравнениям (1.1) прямого преобразования Лапласа (2.1) получаем

$$\begin{aligned} u^{(n)} \frac{\partial \bar{\phi}^{(n)}}{\partial x} + v^{(n)} \frac{\partial \bar{\phi}^{(n)}}{\partial y} + w^{(n)} \frac{\partial \bar{\phi}^{(n)}}{\partial z} + \\ + \bar{\phi}^{(n)}(\sigma^{(n)} + p) = \mu^{(n)} \left(\frac{\partial^2 \bar{\phi}^{(n)}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{\phi}^{(n)}}{\partial y^2} \right) + \\ + \nu^{(n)} \frac{\partial^2 \bar{\phi}^{(n)}}{\partial z^2} + \bar{q}^{(n)}, \end{aligned} \quad (2.2)$$

где

$$\bar{\phi}^{(n)}(p) = L[\phi^{(n)}], \quad \bar{q}^{(n)}(p) = L[q^{(n)}].$$

Далее обозначим через функцию $\bar{\Phi}^{(n)}(\alpha, \beta, z, p)$ преобразование Фурье–Лапласа функции $\phi^{(n)}(x, y, z, t)$. Запишем для $\bar{\Phi}^{(n)}(\alpha, \beta, z, p)$ соответствующее (2.2) уравнение

$$\begin{aligned} \nu^{(n)} \frac{\partial^2 \bar{\Phi}^{(n)}}{\partial z^2} - w^{(n)} \frac{\partial \bar{\Phi}^{(n)}}{\partial z} - \\ - \bar{\Phi}^{(n)}(\mu^{(n)}(\alpha^2 + \beta^2) - \\ - i(\alpha u^{(n)} + \beta v^{(n)}) + (\sigma^{(n)} + p)) = \\ = -\bar{Q}^{(n)}(\alpha, \beta, z, p). \end{aligned} \quad (2.3)$$

Корни характеристического многочлена для уравнения (2.3)

$$\bar{\lambda}_{1,2}^{(n)} = \frac{w^{(n)} \pm \sqrt{(w^{(n)})^2 + 4\nu^{(n)}\bar{\theta}^{(n)}}}{2\nu^{(n)}}, \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned} \bar{\theta}^{(n)} = \mu^{(n)}(\alpha^2 + \beta^2) - \\ - i(\alpha u^{(n)} + \beta v^{(n)}) + (\sigma^{(n)} + p) = \\ = \mu^{(n)}(\alpha^2 + \beta^2) - i(\alpha u^{(n)} + \beta v^{(n)} - s) + \\ + (\sigma^{(n)} + \gamma), \end{aligned}$$

$$p = \gamma + is.$$

Отличие $\bar{\lambda}_j^{(n)}$ (2.4) от стационарного случая (1.4), очевидно, состоит только в замене $\sigma^{(n)}$ на $(\sigma^{(n)} + p)$ в формулах для $\bar{\lambda}^{(n)}$, $\bar{\theta}^{(n)}$. Пусть $\bar{\Phi}^{(n)}(\alpha, \beta, z, p)$ является символом Фурье–Лапласа решения краевой нестационарной задачи, аналогичной (1.3)–(1.7). Тогда функция $\bar{\Phi}^{(n)}(\alpha, \beta, z, p)$ может быть представлена через соответствующие символы Фурье–Лапласа функций Грина $\bar{K}^{(n,j)}(\alpha, \beta, z, p)$ и источников $\bar{Q}^{(j)}(\alpha, \beta, p)$ аналогично (1.21)

$$\begin{aligned} \bar{\Phi}^{(n)}(\alpha, \beta, z, p) = \\ = \sum_{j=1}^{N+1} \bar{K}^{(n,j)}(\alpha, \beta, z, p) \bar{Q}^{(j)}(\alpha, \beta, p). \end{aligned} \quad (2.5)$$

Если функция источника $q^{(j)}$ может быть представлена в виде произведения

$$q^{(j)}(x, y, t) = q^{(j)}(x, y) g^{(j)}(t), \quad (2.6)$$

то при нулевых начальных условиях символ функции источника в образах Фурье–Лапласа будет иметь вид

$$\bar{Q}^{(j)}(\alpha, \beta, p) = Q^{(j)}(\alpha, \beta) \bar{g}^{(j)}(p), \quad (2.7)$$

где $\bar{g}^{(j)}(p) = L[g^{(j)}]$.

Для пространственной нестационарной краевой задачи решение имеет интегральное представление через обратные преобразования Фурье и Лапласа

$$\begin{aligned} \phi^{(n)}(x, y, z, t) &= \frac{1}{8\pi^3 i} \times \\ &\times \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{j=1}^N \bar{K}^{(n,j)}(\alpha, \beta, z, p) \bar{Q}^{(j)}(\alpha, \beta, p) \times \\ &\times \exp(-i(\alpha x + \beta y)) d\alpha d\beta \exp(pt) dp. \end{aligned} \quad (2.8)$$

3. Некоторые особенности решения нестационарной задачи для однородного диффузионного полупространства

Рассмотрим однородное полупространство $-\infty \leq x, y \leq +\infty, z \geq 0$, в котором происходят процессы диффузии-конвекции-распада однокомпонентного вещества. За исключением функции источника уравнение турбулентной диффузии имеет тот же вид, что и (1.1)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} + v \frac{\partial \phi}{\partial y} + w \frac{\partial \phi}{\partial z} + \sigma \phi = \\ = \mu \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) + \nu \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2}. \end{aligned} \quad (3.1)$$

В плоскости $z = 0$ заданы граничные условия третьего типа

$$\left(a\phi - b\nu \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) \Big|_{z=0} = q(x, y)g(t), \quad (3.2)$$

$$q = \begin{cases} q(x, y), & (x, y) \in \Omega; \\ 0, & (x, y) \notin \Omega, \end{cases}$$

где q — пространственная функция источника, заданная в конечной области Ω , $g(t)$ — временная составляющая функции источника, заданная на положительной полуоси. Граничные коэффициенты a, b одновременно не равны нулю. Также потребуем выполнение условия убывания на бесконечности (1.2).

Символы функции Грина задачи (3.1)–(3.2) для полупространств $z \geq 0, z < 0$ имеют вид [8]

$$K(z) = \frac{\exp(\lambda_1 z)}{a - b\nu\lambda_1}, \quad \lambda_1 < 0, \quad z \geq 0, \quad (3.3)$$

$$K(z) = \frac{\exp(\lambda_2 z)}{a - b\nu\lambda_2}, \quad \lambda_2 > 0, \quad z < 0. \quad (3.4)$$

В работе [8] показано, что в стационарном случае для однородного полупространства функции K (3.3), (3.4) могут иметь два вещественных и/или два чисто мнимых простых полюса.

Лемма 1. В нестационарном случае для $\gamma > 0$ при определенных $a, b > 0$ и произвольных допустимых значениях параметров $w, \sigma, \nu, \mu, \alpha, \beta, s$ возможно возникновение двух вещественных полюсов функции $K(\alpha, \beta, p)$ (3.4). Доказательство. Для удобства рассмотрим случай отсутствия конвекции в горизонтальном направлении, когда $u, v = 0$ и положим $\beta = s = 0$. Тогда из уравнения

$$a - b\nu\lambda_2 = 0 \quad (3.5)$$

получаем

$$\lambda_2 = \frac{a}{b\nu} = \frac{w + \sqrt{w^2 + 4\nu(\sigma + \gamma) + 4\nu\mu\alpha^2}}{2\nu}.$$

Обозначим $c = a/b > 0$, тогда

$$2c - w = \sqrt{w^2 + 4\nu\sigma + 4\nu\gamma + 4\nu\mu\alpha^2}, \quad (3.6)$$

откуда получаем нули уравнения (3.5)

$$\alpha_j = \pm \sqrt{\frac{c^2 - cw - \nu\sigma - \nu\gamma}{\nu\mu}}. \quad (3.7)$$

При $c > c_1 > 0$, где

$$c_1 = \frac{w + \sqrt{w^2 + 4\nu\sigma + 4\nu\gamma}}{2}, \quad (3.8)$$

c_1 есть положительный корень уравнения $c^2 - cw - \nu\sigma - \nu\gamma = 0$, значения α_j (3.7) дают решения уравнения (3.5), описывающие положительный и отрицательный полюс функции K (3.4) для нестационарного случая.

Отметим, что при $c_1 > c > 0$ вещественные полюса не возникают.

При наличии полюсов α_j (комплексных в общем случае) для выполнения обратного преобразования Лапласа необходимо, чтобы выполнялось условие $\text{Re } \alpha_j < \gamma$ [4]. Напомним, что в случае однородного полупространства в качестве комплексных полюсов

возможно появление только чисто мнимых полюсов [8].

Лемма 2. Пусть $\varepsilon = c - c_1 > 0$. Для выполнения условия $\alpha_j(\gamma) < \gamma$ для функции K (3.4) необходимо и достаточно, чтобы выполнялось неравенство

$$0 \leq \sqrt{\frac{\varepsilon^2 + \varepsilon\sqrt{w^2 + 4\nu\sigma + 4\nu\gamma}}{\nu\mu}} < \gamma. \quad (3.9)$$

Доказательство необходимости. Подставляя $c = c_1 + \varepsilon > 0$ в выражение (3.7), получаем неравенство (3.9). Для доказательства достаточности производим обратные преобразования над выражениями (3.9), (3.8), получаем $\alpha_j(\gamma) < \gamma$. \square

Аналогичная лемма для функции K (3.3), но теперь уже для a, b разных знаков и $z \geq 0$, доказывается таким же образом.

Численное решение неравенства (3.9) не представляет сложности.

На рис. 1 представлен график $\gamma_0(\varepsilon)$ решения уравнения вида $f(\varepsilon, \gamma) = 0$ в диапазоне $0 \leq \varepsilon \leq 10$, соответствующего неравенству (3.9) для модельных параметров $w = 0,5$, $u = v = 0$, $\mu = \nu = \sigma = 0,1$. Множество корректных значений γ , при которых контур $p = \gamma + is$ лежит правее вещественных полюсов α_j , представляет собой область $\gamma > \gamma_0(\varepsilon)$. Значения же $0 < \gamma < \gamma_0(\varepsilon)$ являются некорректными. Возможность возникновения вещественных полюсов у символа функции Грина многослойного полупространства на данный момент не доказана.

4. Символ функции Грина нестационарной краевой задачи для двух сцепленных диффузионных полупространств с внутренним источником

Рассмотрим пример нестационарной краевой задачи для двух сцепленных полупространств. Первое полупространство занимает область $0 \geq z$, второму полупространству соответствует область $z < 0$. Материальные константы различны: $u^{(n)}, v^{(n)}, w^{(n)}, \sigma^{(n)}, \mu^{(n)}, \nu^{(n)}$, $n = 1, 2$. Первому полупространству соответствует индекс $n = 1$, второму полупространству соответствует индекс $n = 2$. Считаем, что производная функции концентрации терпит разрыв

$$\phi^{(1)}(x, y, z, t) \rightarrow 0, \quad z \rightarrow +\infty, \quad (4.1)$$

$$\begin{aligned} -\nu^{(1)} \frac{\partial \phi^{(1)}(x, y, z, t)}{\partial z} \Big|_{z=0} &= \\ &= -\nu^{(2)} \frac{\partial \phi^{(2)}(x, y, z, t)}{\partial z} \Big|_{z=0} + q(x, y, t), \\ \phi^{(1)}(x, y, z, t) \Big|_{z=0} &= \phi^{(2)}(x, y, z, t) \Big|_{z=0}, \\ \phi^{(2)}(x, y, z) &\rightarrow 0, \quad z \rightarrow -\infty. \end{aligned}$$

Должны выполняться начальные условия

$$\phi^{(n)}(x, y, z, t) \Big|_{t \leq 0} = 0, \quad g(t)_{t \leq 0} = 0. \quad (4.2)$$

Для символа Фурье–Лапласа функции Грина $\bar{K}^{(n)} = \bar{K}^{(n,1)}$ имеем задачу

$$\bar{K}^{(1)}(\alpha, \beta, z, p) \rightarrow 0, \quad z \rightarrow +\infty, \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} -\nu^{(1)} \frac{\partial \bar{K}^{(1)}(\alpha, \beta, z, p)}{\partial z} \Big|_{z=0} &= \\ &= -\nu^{(2)} \frac{\partial \bar{K}^{(2)}(\alpha, \beta, z, p)}{\partial z} \Big|_{z=0} + 1, \end{aligned}$$

$$\bar{K}^{(1)}(\alpha, \beta, z, p) \Big|_{z=0} = \bar{K}^{(2)}(\alpha, \beta, z, p) \Big|_{z=0},$$

$$\bar{K}^{(2)}(\alpha, \beta, z, p) \rightarrow 0 \text{ при } z \rightarrow -\infty.$$

Т.к. по принятому выше условию $\text{Re } \lambda_1^{(n)} < 0$, $\text{Re } \lambda_2^{(n)} > 0$, $n = 1, 2$, то решения для полупространств будут иметь вид

$$\bar{K}^{(1)} = t_1^{(1)} \exp(\lambda_1^{(1)} z), \quad z \geq 0, \quad (4.4)$$

$$\bar{K}^{(2)} = t_2^{(2)} \exp(\lambda_2^{(2)} z), \quad z < 0. \quad (4.5)$$

Относительно вектора $\{t_1^{(1)}, t_2^{(2)}\}^T$, решая систему уравнений

$$\left\| \begin{array}{cc} -\nu^{(1)}\lambda_1^{(1)} & \nu^{(2)}\lambda_2^{(2)} \\ 1 & -1 \end{array} \right\| \left\| \begin{array}{c} t_1^{(1)} \\ t_2^{(2)} \end{array} \right\| = \left\| \begin{array}{c} 1 \\ 0 \end{array} \right\|,$$

в явном виде получаем

$$\begin{aligned} t_1^{(1)} = t_2^{(2)} &= \frac{-1}{\left(\nu^{(1)}\lambda_1^{(1)} - \nu^{(2)}\lambda_2^{(2)}\right)}, \\ \bar{K}^{(1)}(\alpha, \beta, z, p) &= \frac{-\exp(\lambda_1^{(1)} z)}{\left(\nu^{(1)}\lambda_1^{(1)} - \nu^{(2)}\lambda_2^{(2)}\right)}, \quad (4.6) \\ &z \geq 0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bar{K}^{(2)}(\alpha, \beta, z, p) &= \frac{-\exp(\lambda_2^{(2)} z)}{\left(\nu^{(1)}\lambda_1^{(1)} - \nu^{(2)}\lambda_2^{(2)}\right)}, \quad (4.7) \\ &z < 0. \end{aligned}$$

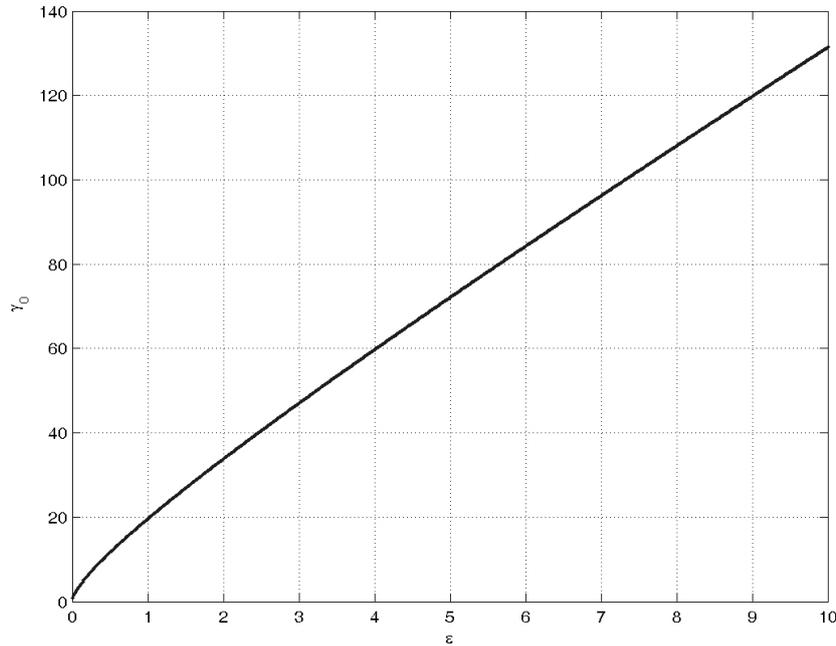


Рис. 1. Зависимость $\gamma_0(\varepsilon)$

5. Численные примеры

Имея формулы (4.6), (4.7) и интегральное представление (2.8) можно рассчитать решение нестационарной трехмерной краевой задачи для сцепленных полупространств, источник излучения в которых задан в виде разрыва нормальной производной на границе (4.3) (сама формула (4.3) соответствует единичному разрыву). Расчет интеграла (2.8) основан на применении алгоритмов интегрирования быстро осциллирующих функций библиотек NAG [6] и IMSL [5].

Для расчетов были выбраны следующие безразмерные модельные параметры полупространств:
 – первое (верхнее) полупространство:

$$w^{(1)} = 0,1, \quad u^{(1)} = 0,5, \quad v^{(1)} = 0,$$

$$\sigma^{(1)} = 0,1, \quad \mu^{(1)} = 0,1, \quad \nu^{(1)} = 0,1, \quad z > 0;$$

– второе (нижнее) полупространство:

$$w^{(2)} = -0,4, \quad u^{(2)} = -0,5, \quad v^{(2)} = 0,$$

$$\sigma^{(2)} = 0,1, \quad \mu^{(2)} = 0,1, \quad \nu^{(2)} = 0,1, \quad z < 0.$$

В качестве функции времени $g^{(1)}(t)$ рассматривалась функция «треугольника» с парамет-

ром $\kappa = 0,1$

$$g^{(1)}(t) = \begin{cases} t, & 0 \leq t \leq \kappa; \\ 2\kappa - t, & \kappa \leq t \leq 2\kappa; \\ 0, & 2\kappa \leq t. \end{cases} \quad (5.1)$$

Для функции $g^{(1)}(t)$ образ Лапласа $\bar{g}^{(1)}(p)$ имеет вид [4]

$$\bar{g}^{(1)}(p) = \frac{(1 - \exp(-\kappa p))^2}{p^2}. \quad (5.2)$$

Пространственная функция источника $q(x, y)$ задана в квадрате

$$q(x, y) = \begin{cases} 1, & |x| \leq L, \quad |y| \leq L; \\ 0, & |x| > L \vee |y| > L. \end{cases} \quad (5.3)$$

$$L = 1/2.$$

В образах Фурье

$$Q^{(1)}(\alpha, \beta) = \frac{\sin(\alpha L) \sin(\beta L)}{(\alpha \beta L^2)}. \quad (5.4)$$

Безразмерное время в расчетах рассматривалось в интервале $1,11 \leq t \leq 5,11$ с шагом $\Delta t = 1,0$.

Как видно из описания параметров полупространств, горизонтальная конвекция в полупространствах имеет противоположные направления и величины $u^{(1)} = -u^{(2)}$, скорости

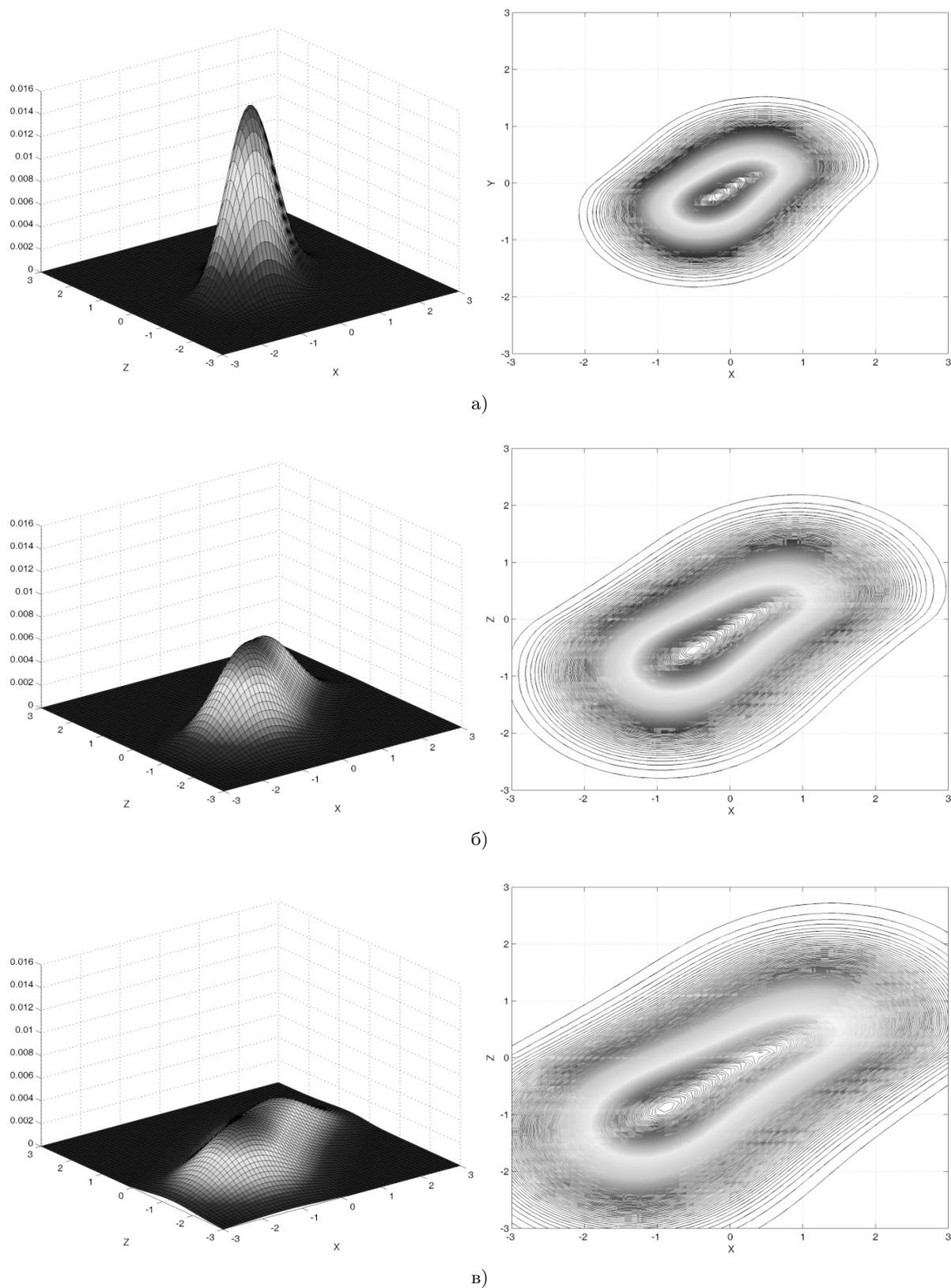


Рис. 2. Вид функции концентрации $\phi(x, y, z, t)|_{y=0}$ в зависимости от времени:
а) $t_1 = 1,11$, б) $t_2 = 2,11$, в) $t_3 = 3,11$

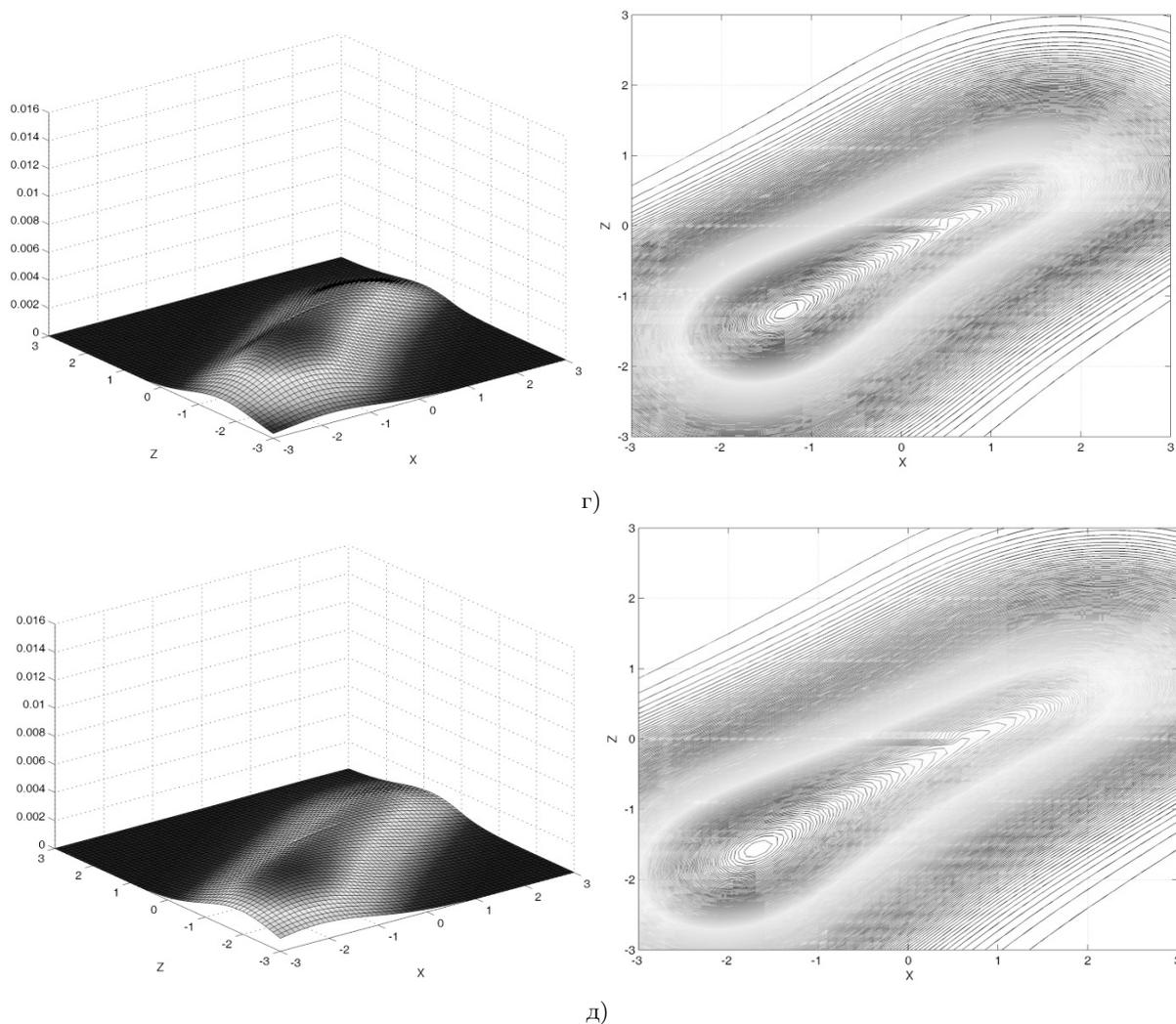


Рис. 2. Вид функции концентрации $\phi(x, y, z, t)|_{y=0}$ в зависимости от времени:
 г) $t_4 = 4,11$, д) $t_5 = 5,11$

вертикальной конвекции имеют противоположные знаки и различные абсолютные величины. В верхнем полупространстве $w^{(1)} = 0,1$ (частицы примеси поднимаются вверх), в нижнем полупространстве $w^{(2)} = -0,4$ (частицы опускаются вниз). По постановке задачи распределение примеси симметрично относительно плоскости XOZ в любой момент времени. На рис. 2 показана функция концентрации $\phi(x, y, z, t)|_{y=0}$ в плоскости XOZ в прямоугольнике $-3 \leq x, z \leq 3$ для разных моментов времени. В левой колонке функция концентрации изображена в виде поверхности, справа — в виде линий уровней. Максимальная амплитуда достигается к моменту времени $t_1 \approx 1,11$, затем она начинает быстро спадать, примесь распространяется от источ-

ника во всех направлениях, основной поток имеет наклон примерно 35° к оси OX . В первые моменты времени (рис. 2а, 2б) картина распространения почти симметрична относительно начала координат, с увеличением времени симметричность заметно нарушается, максимумы концентрации локализуются в нижнем полупространстве, удаляясь от поверхности раздела. Координаты точки максимума концентрации смещаются от точки $(0; 0; 0)$ до точки $(-2,3; 0; -2,3)$.

Если величину максимальной концентрации $\max(t_1) = \max_1$ в момент времени t_1 принять за единицу, то скорость убывания максимальной концентрации по времени выглядит следующим образом: $\max_1 = 1,0$, $\max_2 = 0,48$, $\max_3 = 0,30$, $\max_4 = 0,21$, $\max_5 = 0,16$. Та-

ким образом, после выброса длительностью $\Delta t = 0,2$, за 4 единицы условного времени, начиная с $t_1 = 1,11$, максимальная концентрация уменьшается более чем в 6 раз.

Заключение

Для многослойного полупространства и сцепленных полупространств разработан эффективный численно-аналитический метод построения символа Фурье–Лапласа функции Грина для трехмерных нестационарных задач турбулентной диффузии с внешними или внутренними источниками излучения примесей. Количество слоев может быть велико, и ограничено только вычислительными ресурсами компьютера. Метод позволяет решать краевые задачи конвекции-диффузии-распада не только для кусочно-постоянных сред, но и моделировать градиентные среды, все параметры которых зависят от вертикальной координаты путем дискретизации с малым шагом по вертикали.

Модель многослойного полупространства является лучшей физической моделью атмосферы, чем многослойный пакет слоев, поскольку убывание концентрации в верхних слоях в полупространстве обусловлено не введением специальных граничных условий, а естественным убыванием решения на бесконечности для полупространства.

Показано, что для краевой задачи третьего рода для однородного полупространства в нестационарном случае, как и в стационарном, возможно возникновение вещественных полюсов. Для этого случая указан способ определения корректного контура интегрирования для обратного преобразования Лапласа.

Разработанные модели многослойного полупространства и сцепленных полупространств и ранее разработанные авторами модели многослойного пакета слоев в совокупности охватывают, с учетом трехмерности и нестационарности, основные варианты моделирования неограниченной или полуграниченной атмосферы или океана, которые невозможно корректно моделировать методами конечных разностей или конечных элементов.

Предложенный метод численного обращения трехмерных интегралов Фурье–Лапласа на основе алгоритмов интегрирования быстро осциллирующих функций весьма эффективен, что позволяет решать не только прямые,

но и некоторые обратные задачи турбулентной диффузии.

Приведенный пример решения трехмерной нестационарной задачи для двух сцепленных полупространств является простой моделью распространения примеси на границе вертикально неограниченной атмосферы и океана.

Литература

1. Бекман И.Н. Высшая математика: математический аппарат диффузии. М.: Издательство Юрайт, 2018. 397 с.
2. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Численные методы решения задач конвекции-диффузии. М.: Книжный дом “Либроком”, 2015. 248 с.
3. Hundsdorfer W.H., Verwer J.G. Numerical solution of time-dependent advection-diffusion reaction equations. Springer, Berlin, 2003. 472 p.
4. Эйдерман В.Я. Основы теории функций комплексного переменного и операционного исчисления. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002. 256 с.
5. Международная библиотека математических подпрограмм IMSL. Режим доступа: <https://www.roguewave.com/products-services/imsl-numerical-libraries> (дата обращения: 30.01.2020).
6. The NAG Fortran Library, The Numerical Algorithms Group (NAG), Oxford, United Kingdom. URL: <https://www.nag.com> (дата обращения: 30.01.2020).
7. Сыромятников П.В. Матричный метод решения нестационарных задач конвекции-диффузии в полуграниченных многослойных и градиентных средах // Наука Юга России. 2018. Т. 14. № 4. С. 3–13 DOI: 10.7868/S25000640180401
8. Сыромятников П.В., Кривошеева М.А., Лапина О.Н., Нестеренко А.Г., Никитин Ю.Г. Стационарные процессы диффузии-конвекции-распада в однородном полупространстве // Экологический Вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. 2019. Т. 16. № 4. С. 31–42. DOI: 10.31429/vestnik-16-4-31-42
9. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Численные методы решения обратных задач математической физики. М.: ЛКИ, 2009. 480 с.

References

1. Beckman, I.N. *Higher mathematics: the mathematical apparatus of diffusion*. Yurayt Publishing House, Moscow, 2018. (In Russian)
2. Samarsky, A.A., Vabishchevich, P.N. *Numerical methods for solving convection-diffusion problems*. Book House Librocom, Moscow, 2015. (In Russian)

3. Hundsdorfer, W.H., Verwer, J.G. *Numerical solution of time-dependent advection-diffusion reaction equations*. Springer, Berlin, 2003.
4. Eiderman, V.Ya. *Fundamentals of the theory of functions of a complex variable and operational calculus*. FIZMATLIT, Moscow, 2002. (In Russian)
5. International library of mathematical routines IMSL. Available at: <https://www.roguewave.com/products-services/imsl-numerical-libraries> (accessed 01.30.2020).
6. The NAG Fortran Library, The Numerical Algorithms Group (NAG), Oxford, United Kingdom. Available at: <https://www.nag.com> (accessed 01.30.2020).
7. Syromyatnikov, P.V. Matrichnyy metod resheniya nestatsionarnykh zadach konveksii-diffuzii v poluogranichennykh mnogoslonykh i gradientnykh sredakh [The matrix method for solving unsteady convection-diffusion problems in semi-bounded multilayer and gradient media]. *Nauka Yuga Rossii* [Science of the South of Russia], 2018, vol. 14, no. 4, pp. 3–13. DOI: 10.7868/S25000640180401 (In Russian)
8. Syromyatnikov, P.V., Krivosheeva, M.A., Lapina, O.N., Nesterenko, A.G., Nikitin, Yu.G. Stationarnye protsessy diffuzii-konveksii-raspada v odnorodnom poluprostranstve [Stationary processes of diffusion-convection-decay in a homogeneous half-space]. *Ekologicheskii Vestnik nauchnykh tsentrov Chernomorskogo ekonomicheskogo sotrudnichestva* [Ecological Bulletin of the BSEC Scientific Centers], 2019, vol. 16, no. 4, pp. 31–42. DOI: 10.31429/vestnik-16-4-31-42 (In Russian)
9. Samarsky, A.A., Vabishchevich, P.N. *Chislennyye metody resheniya obratnykh zadach matematicheskoy fiziki* [Numerical methods for solving inverse problems of mathematical physics]. LCI, Moscow, 2009. (In Russian)

© Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества, 2020

© Сыромятников П. В., Кривошеева М. А., Лапина О. Н., Нестеренко А. Г., Никитин Ю. Г., 2020

Статья поступила 2 февраля 2020 г.