

МЕХАНИКА

УДК 539.3

DOI: 10.31429/vestnik-17-3-37-47

**АНАЛИТИЧЕСКОЕ И ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
СТАЦИОНАРНОЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ
ДИФФУЗИИ–КОНВЕКЦИИ–РАСПАДА ДЛЯ ОДНОРОДНОГО СЛОЯ
НА ОСНОВЕ УРАВНЕНИЙ ТУРБУЛЕНТНОЙ ДИФФУЗИИ**

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

ANALYTICAL AND NUMERICAL MODELING OF A STATIONARY BOUNDARY VALUE
PROBLEM OF DIFFUSION-CONVECTION-DECAY FOR A HOMOGENEOUS LAYER
BASED ON THE EQUATIONS OF TURBULENT DIFFUSION

M. A. Krivosheeva¹, O. N. Lapina¹, A. G. Nesterenko¹, Yu. G. Nikitin¹, P. V. Syromyatnikov^{1,2}

¹ Kuban State University, Krasnodar, 350040, Russia

² Federal Research Center Southern Scientific Center of the Russian Academy of Sciences,
Rostov-on-Don, 344006, Russia
e-mail: syromyatnikov_pv@mail.ru

Abstract. For comparison and testing purposes, an analytical and numerical method has been developed for solving the boundary value problem of convection-diffusion-decay for a homogeneous layer. A model stationary boundary value problem of the third kind is described by the equations of turbulent diffusion. In the analytical model, the Fourier symbol of the Green's function for the boundary value problem is constructed, the calculation of the Fourier integral is based on the theory of residues. In the numerical model, the Fourier integral is calculated using an algorithm based on the Gauss–Kronrod formulas.

In the two-dimensional case, comparative calculations for the near and middle zones showed good agreement between the results. The accuracy of calculations within each model can be changed by several orders of magnitude. Calculations of the substance concentration function for two plane problems of convection–diffusion–decay are given as examples. The implementation of the analytical method in the flat case is relatively straightforward. Numerical calculation is much simpler and more convenient for engineering and serial scientific calculations.

Numerical integration is realized just as easily in the spatial case as in the two-dimensional case, but the counting time increases significantly. Therefore, a balance is required between the required accuracy and the calculation time. For the spatial case, an analytical approach based on the theory of residues was fundamentally developed in the works of other authors. However, the method is rather cumbersome and better suited for theoretical research.

Keywords: stationary turbulent diffusion in a layer, boundary value problem of the third kind, Green's function, Fourier transform, theory of residues, numerical integration.

Введение

На сегодняшний день чаще всего для численного решения различных задач конвекции-

диффузии-распада используются методы конечных разностей и конечного элемента [1]. Данные методы достаточно универсальны, но, например, для полугограниченных тел, рас-

Кривошеева Маргарита Александровна, магистрант 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.

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.

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).

смаатриваемых в данной работе, с их помощью нельзя получить корректное решение.

Методы интегральных преобразований являются гибким инструментом исследования различных задач математической физики как для конечных, так и для полубесконечных областей. С их помощью можно решать прямые, обратные, смешанные краевые задачи конвекции–диффузии–распада в разных постановках [2–4].

Важность разработки аналитических и численно-аналитических методов, которые по-прежнему являются основным инструментом исследования, помимо прочего заключается в возможности получения «эталонных» значений для тестирования численных методов. Такое тестирование особенно важно в случае отсутствием строгих теоретических оценок скорости сходимости численного метода, когда необходимо установить практические оценки точности вычислений в зависимости от основных параметров.

Предлагаемая работа посвящена качественному и количественному сопоставлению двух методов решения краевых задач конвекции-диффузии, разработанных авторами ранее. Исходным для указанных методов является построение интегрального представления решения краевой задачи в образах Фурье. Сами методы реализуют два способа вычисления интегрального представления. Первый — аналитический — метод использует теорию вычетов [5], второй основан на алгоритмах интегрирования сильно осциллирующих функций [6]. Данные алгоритмы реализуют квадратурные формулы Гаусса–Кронрода высокого порядка, для которых скорость сходимости оценивается приближенно [7]. Имеется достаточное число данных, полученных разными авторами и различными, в том числе и сходными [3, 8], методами. Сопоставление с ними приводило иногда к хорошему совпадению, а иногда — к существенным различиям. Данные расхождения потребовали более систематического тестирования собственных методов, поскольку аналогичные численные и численно-аналитические алгоритмы положены в основу решения гораздо более сложных краевых задач, исследуемых авторами [9].

1. Постановка задачи и общая схема решения

Рассмотрим однородный слой $-\infty \leq x, y \leq +\infty, 0 \leq z \leq h$, в котором происходят процессы диффузии–конвекции–распада од-

нокомпонентного вещества. Для среднемасштабного приближения стационарное уравнение турбулентной диффузии, описывающее данные процессы, имеет вид [3, 4]

$$u \frac{\partial \phi}{\partial x} + v \frac{\partial \phi}{\partial y} + w \frac{\partial \phi}{\partial z} + \sigma \phi = \mu \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) + \nu \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2}. \quad (1.1)$$

Здесь ϕ — концентрация вещества, u, v, w — скорости конвекции в направлениях осей OX, OY, OZ соответственно, $\sigma \geq 0$ — коэффициент распада, $\mu > 0, \nu > 0$ — коэффициенты горизонтальной и вертикальной диффузии соответственно. В плоскостях $z = 0, z = h$ заданы граничные условия общего вида

$$\left(a_h \phi - b_h \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) \Big|_{z=h} = 0, \quad (1.2)$$

$$\left(a_0 \phi - b_0 \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) \Big|_{z=0} = \begin{cases} q(x, y), & (x, y) \in \Omega; \\ 0, & (x, y) \notin \Omega, \end{cases} \quad (1.3)$$

где q — функция источника, заданная в конечной области Ω , граничные коэффициенты a_j, b_j одновременно не равны нулю. Из физических соображений требуется выполнение условия убывания на бесконечности

$$\lim_{r \rightarrow +\infty} \phi(x, y, z) = 0, \quad (1.4)$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}.$$

Введем двумерное преобразование Фурье $F_{x,y}$ по x, y с параметрами α, β и применим его к функции концентрации ϕ и источника q . Их символы Фурье обозначим $\Phi = F_{x,y}[\phi], Q = F_{x,y}[q]$. Введем также символ Фурье функции Грина $K = F_{x,y}[k]$, соответствующей краевой задаче (1.1)–(1.4). Решение в образах Фурье будем искать в виде

$$\Phi(\alpha, \beta, z) = K(\alpha, \beta, z)Q(\alpha, \beta). \quad (1.5)$$

Решение исходной краевой задачи представим в виде обратного преобразования Фурье

$$\phi(x, y, z) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} K(\alpha, \beta, z) \times Q(\alpha, \beta) \exp(-i(\alpha x + \beta y)) d\alpha d\beta. \quad (1.6)$$

В плоском случае формула (1.6) принимает вид

$$\phi(x, z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(\alpha, 0, z) \times Q(\alpha) \exp(-i\alpha x) d\alpha. \quad (1.7)$$

В дальнейшем интеграл (1.6) также будет рассматриваться в полярных координатах

$$\begin{aligned} x &= r \cos \psi, & y &= r \sin \psi, \\ r &= \sqrt{x^2 + y^2}, & \psi &= \arctg \frac{y}{x}, \\ \alpha &= \tau \cos \gamma, & \beta &= \tau \sin \gamma, \\ \tau &= \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}, & \gamma &= \arctg \frac{\beta}{\alpha} \end{aligned} \quad (1.8)$$

в виде

$$\begin{aligned} \phi(r, \psi, z) &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} d\gamma \times \\ &\times \int_0^{+\infty} K(\tau, \gamma, z) Q(\tau, \gamma) \tau \times \\ &\times e^{-i\tau r \cos(\gamma - \psi)} d\tau. \end{aligned} \quad (1.9)$$

2. Некоторые аналитические свойства символа функции Грина

Условия (1.2), (1.3) имеют общий вид, из которых может быть получена как частный случай задача Дирихле, задача Неймана или задача третьего рода. В качестве модельного примера в дальнейшем будем рассматриваться задачу Неймана–Дирихле, получаемую из (1.1)–(1.3) при следующих параметрах граничных условий

$$a_h = 1, \quad b_h = 0, \quad a_0 = 0, \quad b_0 = -1. \quad (2.1)$$

Обратим внимание на то, что на верхней поверхности слоя задаются условия Дирихле, на нижней поверхности — условия Неймана.

Выбор модельной задачи такого вида объясняется простотой конечных формул, что позволяет относительно легко сравнивать численное и аналитическое решение. Описанный ход исследования для других случаев может быть проведен по аналогии.

Символ функции Грина $K(\alpha, \beta, z)$ (1.1)–(1.3), (2.1) строится в виде

$$K(\alpha, \beta, z) = \sum_{j=1}^2 s_j \exp(\lambda_j(\alpha, \beta)z), \quad (2.2)$$

где s_j — неизвестные коэффициенты. Для K должны выполняться краевые условия, вытекающие из (1.2)–(1.3)

$$K(h) = 0, \quad \left. \frac{\partial K(z)}{\partial z} \right|_{z=0} = 1. \quad (2.3)$$

В образах Фурье решение задачи (2.1)–(2.3) легко находится

$$K(z) = \frac{-e^{(\lambda_2 h + \lambda_1 z)} + e^{(\lambda_1 h + \lambda_2 z)}}{\Delta}, \quad (2.4)$$

$$\Delta = \lambda_2 \exp(\lambda_1 h) - \lambda_1 \exp(\lambda_2 h), \quad (2.5)$$

$$\lambda_1 = \frac{w + \sqrt{D}}{2\nu}, \quad \lambda_2 = \frac{w - \sqrt{D}}{2\nu},$$

$$D = w^2 + 4\nu(\sigma + \mu(\alpha^2 + \beta^2)) - i4\nu(\alpha u + \beta v). \quad (2.6)$$

Выше λ_j — корни характеристического уравнения

$$\nu\lambda^2 - w\lambda - \theta = 0, \quad (2.7)$$

$$\theta = \sigma + \mu(\alpha^2 + \beta^2) - i(\alpha u + \beta v),$$

соответствующего уравнению

$$\nu \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} - w \frac{\partial \Phi}{\partial z} - \theta \Phi = 0.$$

Лемма 1. Пусть $\alpha, \beta \in R$, тогда

$$\lambda_j(-\alpha, -\beta) = \bar{\lambda}_j(\alpha, \beta).$$

Доказательство. Представим модуль и аргумент дискриминанта D уравнения (2.7)

$$|D| = \sqrt{(\operatorname{Re} D)^2 + (\operatorname{Im} D)^2},$$

$$\begin{aligned} \arg D = \vartheta(\alpha, \beta) &= \arctg \frac{\operatorname{Im} D}{\operatorname{Re} D} = \\ &= \arctg \frac{-4\nu(\alpha u + \beta v)}{w^2 + 4\nu(\mu(\alpha^2 + \beta^2) + \sigma)}. \end{aligned}$$

Очевидно, что

$$\vartheta(-\alpha, -\beta) = -\vartheta(\alpha, \beta).$$

Квадратный корень из D запишем в виде

$$\sqrt{D} = \sqrt{|D|} e^{(i\vartheta/2 + \pi k)}, \quad k = 0, 1.$$

При обозначении λ_j условимся выбирать $\lambda_1 \leftrightarrow k = 0$, $\lambda_2 \leftrightarrow k = 1$, тогда $\operatorname{Re} \lambda_1 \geq 0$, $\operatorname{Re} \lambda_2 \leq 0$ (более подробно свойства λ_j описаны в [9]). Таким образом,

$$\lambda_{1,2}(\alpha, \beta) = \frac{w \pm \sqrt{|D|} e^{i\vartheta(\alpha, \beta)/2}}{2\nu}.$$

Тогда

$$\begin{aligned} \lambda_{1,2}(-\alpha, -\beta) &= \\ &= \frac{w \pm \sqrt{|D|} e^{i\vartheta(-\alpha, -\beta)/2}}{2\nu} = \\ &= \frac{w \pm \sqrt{|D|} e^{-i\vartheta(\alpha, \beta)/2}}{2\nu} = \\ &= \bar{\lambda}_{1,2}(\alpha, \beta). \end{aligned}$$

Лемма доказана. \square

Для собственных значений λ_j справедливы асимптотики, доказательство которых вполне очевидно:

$$\begin{aligned} \lambda_1(\alpha, \beta) &\sim +\sqrt{\frac{\mu}{\nu}} \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} + \\ &\quad + o\left(\left|\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}\right|\right), \\ \lambda_2(\alpha, \beta) &\sim -\sqrt{\frac{\mu}{\nu}} \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} + \\ &\quad + o\left(\left|\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}\right|\right), \left|\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}\right| \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Лемма 2. Функция $K(\alpha, \beta)|_{z=0}$ (2.4) имеет асимптотическое представление

$$\begin{aligned} K(\alpha, \beta) &\sim -\frac{1}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \times \\ &\quad \times \sqrt{\frac{\nu}{\mu}} + o\left(\left|\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}\right|\right), \\ &\quad \left|\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}\right| \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Доказательство. Учитывая (2.8), получаем

$$\begin{aligned} K(\alpha, \beta) &\sim \\ &\sim \frac{-e^{\lambda_2 h} + e^{\lambda_1 h}}{\lambda_2 e^{\lambda_1 h} - \lambda_1 e^{\lambda_2 h}} \sim \\ &\sim \frac{e^{\lambda_1 h}}{\lambda_2 e^{\lambda_1 h}} = \frac{1}{\lambda_2} \sim \\ &\sim -\frac{1}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \sqrt{\frac{\nu}{\mu}} + \\ &\quad + o\left(\left|\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}\right|\right). \end{aligned}$$

Лемма доказана. \square

Данная асимптотика означает, что оригинал функции Грина $k(x, y) = F_{x,y}^{-1} K(\alpha, \beta)$ обладает логарифмической особенностью в нуле вида

$$k(x, y) \sim f(x, y) \ln r, \quad r = \sqrt{x^2 + y^2} \rightarrow 0,$$

где $f(x, y)$ — некоторая непрерывная в окрестности нуля функция, $f(0,0) \neq 0$.

Лемма 3. При $\alpha, \beta \in R$ символ функции Грина $K(\alpha, \beta)$ (2.4) обладает свойством

$$K(-\alpha, -\beta, z) = \bar{K}(\alpha, \beta, z). \quad (2.10)$$

Доказательство.

$$\begin{aligned} K(-\alpha, -\beta, z) &= \\ &= \frac{-e^{(\bar{\lambda}_2 h + \bar{\lambda}_1 z)} + e^{(\bar{\lambda}_1 h + \bar{\lambda}_2 z)}}{\bar{\lambda}_2 e^{\bar{\lambda}_1 h} - \bar{\lambda}_1 e^{\bar{\lambda}_2 h}} = \\ &= \frac{-e^{(\lambda_2 h + \lambda_1 z)} + e^{(\lambda_1 h + \lambda_2 z)}}{\lambda_2 e^{\lambda_1 h} - \lambda_1 e^{\lambda_2 h}} = \\ &= \left(\frac{-e^{(\lambda_2 h + \lambda_1 z)} + e^{(\lambda_1 h + \lambda_2 z)}}{\lambda_2 e^{\lambda_1 h} - \lambda_1 e^{\lambda_2 h}} \right) = \\ &= \bar{K}(\alpha, \beta, z). \end{aligned}$$

Лемма доказана. \square

Доказанное свойство означает, что $\operatorname{Re} K(\alpha, \beta, z)$ — четная функция по совокупности вещественных переменных (α, β) , $\operatorname{Im} K(\alpha, \beta, z)$ — нечетная.

Лемма 4. Оригинал функции Грина обладает свойством

$$\operatorname{Re} k(x, y, z) \neq 0, \quad \operatorname{Im} k(x, y, z) \equiv 0. \quad (2.11)$$

Доказательство. В полярных координатах (1.8) свойство (2.10) представляется иначе:

$$K(\tau, \gamma \pm \pi, z) = \bar{K}(\tau, \gamma, z).$$

Преобразуем интеграл (1.9) (полагая $Q(\tau, \gamma) = 1$) следующим образом:

$$\begin{aligned} k(r, \psi) \times 4\pi^2 &= \\ &= \int_{\psi-\pi/2}^{\psi+\pi/2} \int_0^{\infty} K(\tau, \gamma) \tau e^{-i\eta} d\tau d\gamma + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \int_{\psi+\pi/2}^{\psi+3\pi/2+\infty} \int_0^{\infty} K(\tau, \gamma) \tau e^{-i\eta} d\tau d\gamma = \\
 & = \int_{\psi-\pi/2}^{\psi+\pi/2+\infty} \int_0^{\infty} K(\tau, \gamma) \tau e^{-i\eta} d\tau d\gamma + \\
 & + \int_{\psi-\pi/2}^{\psi+\pi/2+\infty} \int_0^{\infty} K(\tau, \gamma + \pi) \tau e^{+i\eta} d\tau d\gamma = \\
 & = \int_{\psi-\pi/2}^{\psi+\pi/2+\infty} \int_0^{\infty} K(\tau, \gamma) \tau e^{-i\eta} d\tau d\gamma + \\
 & + \int_{\psi-\pi/2}^{\psi+\pi/2+\infty} \int_0^{\infty} \bar{K}(\tau, \gamma) \tau e^{+i\eta} d\tau d\gamma, \\
 & \eta = r\tau \cos(\gamma - \psi).
 \end{aligned}$$

Запишем последние два интеграла, заменяя экспоненту на синусы и косинусы:

$$\begin{aligned}
 k(r, \psi) \times 4\pi^2 & = \int_{\psi-\pi/2}^{\psi+\pi/2} d\gamma \int_0^{\infty} \tau \times \\
 & (\operatorname{Re} K \cos \eta + \operatorname{Im} K \sin \eta) d\tau + \\
 & + \int_{\psi-\pi/2}^{\psi+\pi/2} d\gamma \int_0^{\infty} \tau i \times \\
 & \times (-\operatorname{Re} K \sin \eta + \operatorname{Im} K \cos \eta) d\tau = \\
 & = \int_{\psi-\pi/2}^{\psi+\pi/2} d\gamma \int_0^{\infty} \tau \times \\
 & \times (\operatorname{Re} K \cos \eta + \operatorname{Im} K \sin \eta) d\tau + \\
 & + \int_{\psi-\pi/2}^{\psi+\pi/2} d\gamma \int_0^{\infty} \tau i \times \\
 & \times (\operatorname{Re} K \sin \eta - \operatorname{Im} K \cos \eta) d\tau = \\
 & = 2 \int_{\psi-\pi/2}^{\psi+\pi/2} d\gamma \int_0^{\infty} \tau \times \\
 & \times (\operatorname{Re} K \cos \eta + \operatorname{Im} K \sin \eta) d\tau.
 \end{aligned}$$

Как видно, действительная часть интеграла $\operatorname{Re} k(r, \psi, z) \neq 0$ не равняется тождественно

нулю, мнимая часть тождественно равна нулю $\operatorname{Im} k(r, \psi, z) \equiv 0$. Это означает, что свойство (2.11) выполнено (в том числе и для плоского случая).

Лемма доказана. \square

3. Формулы для полюсов символа функции Грина

При выводе формул полюсов ограничимся плоским случаем, когда $\alpha \in C$, $\beta \equiv 0$. Уравнение, получаемое из (2.5),

$$\Delta = \lambda_2 \exp(\lambda_1 h) - \lambda_1 \exp(\lambda_2 h) = 0, \quad (3.1)$$

приведем к виду

$$\exp(h(\lambda_1 - \lambda_2)) = \lambda_1 / \lambda_2. \quad (3.2)$$

В рассматриваемом случае однородного слоя, в отличие от аналогичной задачи для полупространства [9], когда помимо мнимых могут возникать и вещественные полюсы, возможно наличие только чисто мнимых полюсов у функции K (2.4). Рассмотрим чисто мнимые значения

$$\alpha = it, \quad t \in R.$$

Тогда

$$\lambda_{1,2} = \frac{w \pm \sqrt{D_0}}{2\nu},$$

$$D_0 = w^2 - 4\nu(\mu t^2 - \sigma - ut), \quad (3.3)$$

здесь D_0 — дискриминант исходного характеристического уравнения (2.7).

Найдем t_j^0 — нули D_0 , представив D_0 в более удобном виде

$$D_0 = -\mu t^2 + ut + \left(\sigma + \frac{w^2}{4\nu}\right) = 0. \quad (3.4)$$

Они будут следующими

$$t_1^0 = \frac{u - \sqrt{D}}{2\mu}, \quad t_2^0 = \frac{u + \sqrt{D}}{2\mu},$$

где

$$D = u^2 + 4\mu \left(\sigma + \frac{w^2}{4\nu}\right) \geq 0.$$

Очевидно, что $t_1^0 \leq t_2^0$. Точное равенство $t_1^0 = t_2^0 = 0$ возникает только в специальном случае, соответствующем диффузии без горизонтальной конвекции и распада, когда

$$u = v = \sigma = 0, \quad \mu \neq 0, \quad \nu \neq 0. \quad (3.5)$$

При этом

$$\lambda_1 = \alpha \sqrt{\frac{\mu}{\nu}}, \quad \lambda_2 = -\alpha \sqrt{\frac{\mu}{\nu}}, \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial \lambda_1}{\partial \alpha} = \sqrt{\frac{\mu}{\nu}}, \quad \frac{\partial \lambda_2}{\partial \alpha} = -\sqrt{\frac{\mu}{\nu}}, \quad (3.7)$$

$$\Delta(\alpha) = \Delta(it) = -it\sqrt{\frac{\mu}{\nu}} 2 \cos\left(ht\sqrt{\frac{\mu}{\nu}}\right). \quad (3.8)$$

Корни $\Delta(\alpha)$ (3.8) для случая (3.5) можно найти непосредственно

$$t_0 = 0, t_{\pm k} = \frac{1}{h}\sqrt{\frac{\nu}{\mu}}\left(\frac{\pi}{2} \pm 2\pi(k-1)\right), \quad (3.9)$$

$$k = 1, 2, \dots$$

Тогда

$$\alpha_{\pm k} = \frac{i}{h}\sqrt{\frac{\nu}{\mu}}\left(\frac{\pi}{2} \pm 2\pi(k-1)\right), \quad (3.10)$$

$$\Delta'(\alpha_k) = 2\sqrt{\frac{\mu}{\nu}} \times (h_k \sin h_k - \cos h_k), \quad (3.11)$$

$$h_k = t_k h \sqrt{\frac{\mu}{\nu}}.$$

Полус $\alpha_0 = 0$ является сократимым, поскольку числитель также равен нулю. Формул (3.6)–(3.11) достаточно для реализации вычислений интеграла (1.7) по вычетам (см. п. 4) для случая (3.5). Далее, в интервале $t_1^0 < t < t_2^0$ дискриминант (3.4) $D_0 > 0$, $\text{Re } \lambda_1 > \text{Re } \lambda_2$, $\text{Im } \lambda_j = 0$. При $t_2^0 < t$ или $t < t_1^0$ величина $D_0 < 0$. При этом λ_j являются комплексно-сопряженными числами

$$\text{Re } \lambda_1 = \text{Re } \lambda_2 = \frac{w}{2\nu}, \quad \text{Im } \lambda_1 = -\text{Im } \lambda_2.$$

Далее

$$\lambda_1 - \lambda_2 = 2i \text{Im } \lambda_1 = -2i \text{Im } \lambda_2,$$

$$\frac{\lambda_1}{\lambda_2} = \frac{|\lambda_1| e^{i\psi_1}}{|\lambda_2| e^{i\psi_2}} = \frac{e^{i\psi_1}}{e^{-i\psi_1}} = e^{i2\psi_1} = e^{i2 \arg \lambda_1}.$$

Теперь

$$\exp(h(\lambda_1 - \lambda_2)) = \exp(2ih \text{Im } \lambda_1) = \exp(2i \arg \lambda_1).$$

Уравнение (3.1) приведено к виду

$$2ih \text{Im } \lambda_1 = 2i \arg \lambda_1 = 2i \arctg \frac{\text{Im } \lambda_1}{\text{Re } \lambda_1}. \quad (3.12)$$

Запишем уравнение (3.12) через тангенс

$$\text{tg}(h \text{Im } \lambda_1) = \frac{h \text{Im } \lambda_1}{h \text{Re } \lambda_1}.$$

Обозначим

$$y = h \text{Im } \lambda_1, \quad p = 2\nu/hw. \quad (3.13)$$

Таким образом, получено основное вещественное уравнение

$$py = \text{tg}(y). \quad (3.14)$$

Если y_j корень уравнения (3.14), то $-y_j$ также корень этого уравнения. Следовательно, при решении уравнения (3.14) можно обойтись только одним интервалом, например, $0 \leq y \leq +\infty$. Будем обозначать положительные корни y_j , соответствующие им отрицательные корни $y_{-j} = -y_j$. Корням y_j соответствуют такие α_j , что при $t > t_2^0$ или $t < t_1^0$ условимся считать $\text{Im } \lambda_1(it) > 0$, $\text{Im } \lambda_2(it) < 0$. Корню $y_0 = 0$ соответствуют значения $t_{1,2}^0$, соответствующие корням дискриминанта D_0 (3.4), когда $t_1^0 \neq t_2^0$: $\text{Im } \lambda_j = w/2\nu$, $\text{Im } \lambda_j = 0$, $\Delta = 0$. При этом числитель функции K (2.4) также равняется нулю, поэтому данная особенность сократима. Так как по условию (3.13) $\text{Im } \lambda_1(\alpha_j) = y_j/h$, тогда

$$\mu\alpha^2 - u\alpha - \sigma - \frac{w^2}{4\nu} - \frac{y_j^2}{h^2}\nu = 0.$$

Этим вещественным значениям y_j соответствуют чисто мнимые α_j :

$$\alpha_j = i \frac{u + \sqrt{\tilde{D}}}{2\mu}, \quad \text{Im } \alpha_j > 0, \quad (3.15)$$

$$\alpha_{-j} = i \frac{u - \sqrt{\tilde{D}}}{2\mu}, \quad \text{Im } \alpha_j < 0, \quad (3.16)$$

$$\tilde{D} = u^2 + 4\mu \left(\sigma + \frac{w^2}{4\nu} + \frac{y_j^2}{h^2}\nu \right). \quad (3.17)$$

Дискриминант \tilde{D} (3.17) строго положителен при $y_j \neq 0$, и, очевидно, что при этом $\tilde{D} > u^2$,

$$\frac{u - \sqrt{\tilde{D}}}{2\mu} < 0, \quad \frac{u + \sqrt{\tilde{D}}}{2\mu} > 0.$$

Каждому положительному y_j будет соответствовать только одно положительное решение α_j , каждому отрицательному y_{-j} будет соответствовать только одно отрицательное решение α_{-j} . Несмотря на то, что корни уравнения (3.14) y_j симметричны относительно нуля, при $u \neq 0$ нули α_j (3.15) и α_{-j} (3.16) такой симметрией не обладают. С увеличением номера j довольно быстро y_j выходят на асимптотику вида

$$y_{\pm j} \sim \pm \left(j\pi - \frac{\pi}{2} \right). \quad (3.18)$$

Для получения вычета в простом полюсе вычислим производную знаменателя Δ . Найдем производные λ_1, λ_2 по α

$$\frac{\partial \lambda_1}{\partial \alpha} = \frac{(2\mu\alpha - iu)}{\sqrt{w^2 + 4\nu(\mu\alpha^2 + \sigma - i\alpha u)}},$$

$$\frac{\partial \lambda_2}{\partial \alpha} = -\frac{\partial \lambda_1}{\partial \alpha}.$$

В интервале $t_1 < t < t_2$ величины $\lambda'_n(it)$ являются чисто мнимыми

$$\lambda'_n(it) = \frac{\pm i(2\mu t - u)}{\sqrt{w^2 + 4\nu(-\mu t^2 + \sigma + tu)}}.$$

При $t > t_2$ или $t < t_1$ величины $\lambda'_n(it)$ являются вещественными

$$\lambda'_n(it) = \frac{\pm(2\mu t - u)}{\sqrt{4\nu(\mu t^2 - \sigma - tu) - w^2}}. \quad (3.19)$$

Далее

$$\frac{\partial \Delta}{\partial \alpha} = e^{\lambda_1 h} (h\lambda_2 \lambda'_1 + \lambda'_2) - e^{\lambda_2 h} (h\lambda'_2 \lambda_1 + \lambda'_1).$$

С учетом свойства (3.19) получаем

$$\frac{\partial \Delta}{\partial \alpha} = \left[e^{\lambda_1 h} (h\lambda_2 - 1) + e^{\lambda_2 h} (h\lambda_1 - 1) \right] \lambda'_1. \quad (3.20)$$

Лемма 5. Пусть $\alpha = it, t \in R$. Тогда при $D_0 > 0$ производная $\partial \Delta / \partial \alpha$ является чисто мнимой величиной, при $D_0 < 0$ производная $\partial \Delta / \partial \alpha \in R$.

Доказательство. Пусть $D_0 > 0$, при этом

$$\operatorname{Re} \lambda_j \neq 0, \quad \operatorname{Im} \lambda_j = 0,$$

$$\operatorname{Re} \lambda'_j \equiv 0, \quad \operatorname{Im} \lambda'_1 = -\operatorname{Im} \lambda'_2.$$

Тогда производная

$$\frac{\partial \Delta}{\partial \alpha} = e^{\lambda_1 h} (h\lambda_2 \lambda'_1 + \lambda'_2) - e^{\lambda_2 h} (h\lambda'_2 \lambda_1 + \lambda'_1),$$

является чисто мнимой величиной. При $D_0 < 0$ имеем

$$\operatorname{Re} \lambda_1 \equiv \operatorname{Re} \lambda_2, \quad \operatorname{Im} \lambda_1 = -\operatorname{Im} \lambda_2,$$

$$\operatorname{Re} \lambda'_1 = -\operatorname{Re} \lambda'_2, \operatorname{Im} \lambda'_j \equiv 0.$$

Запишем $\partial \Delta / \partial \alpha$ в виде

$$\frac{\partial \Delta}{\partial \alpha} = \lambda'_1 \left[e^{\lambda_1 h} (h\bar{\lambda}_1 - 1) + e^{\bar{\lambda}_1 h} (h\lambda_1 - 1) \right].$$

В квадратных скобках стоит сумма сопряженных чисел, являющаяся действительной величиной, множитель λ'_1 — действительный, поэтому $\partial \Delta / \partial \alpha = \Delta' \in R$. Лемма доказана. \square

Рассмотрим функцию

$$\chi(\alpha, z, h) = \frac{e^{(\lambda_1 h + \lambda_2 z)} - e^{(\lambda_2 h + \lambda_1 z)}}{\Delta'}, \quad (3.21)$$

входящую в формулу вычета $\operatorname{res} K(\alpha_k)$ (4.2).

Лемма 6. Пусть $\alpha = it, t \in R$. Тогда функция χ (3.21) является чисто мнимой функцией при любом знаке D_0 (3.3).

Доказательство. При $D_0 > 0$, согласно Лемме 5, числитель χ — действительная функция, знаменатель Δ' — чисто мнимая функция. Таким образом, χ в этом случае — чисто мнимая функция. При $D_0 < 0$, согласно той же Лемме 5, числитель χ , как разность сопряженных величин, есть чисто мнимая величина. При делении на действительную величину знаменателя Δ' получаем чисто мнимую функцию χ . Лемма доказана. \square

4. Численные результаты

Рассмотрим случай, решение для которого представляется в виде интеграла (1.7), когда источник излучения задается в виде дельта-функции $q(x) = \delta(x)$ (и, соответственно, $Q(\alpha) = 1$). В этом случае интеграл (1.7), в силу аналитичности K (2.4) и асимптотики (2.9), можно вычислить по теории вычетов с помощью леммы Жордана [5], замыкая контур в верхнюю, либо в нижнюю полуплоскость, в зависимости от знака x :

$$\phi(x, z) = \begin{cases} \omega, & \operatorname{Im} \alpha_k > 0, x < 0, \\ -\omega, & \operatorname{Im} \alpha_k < 0, x > 0, \end{cases} \quad (4.1)$$

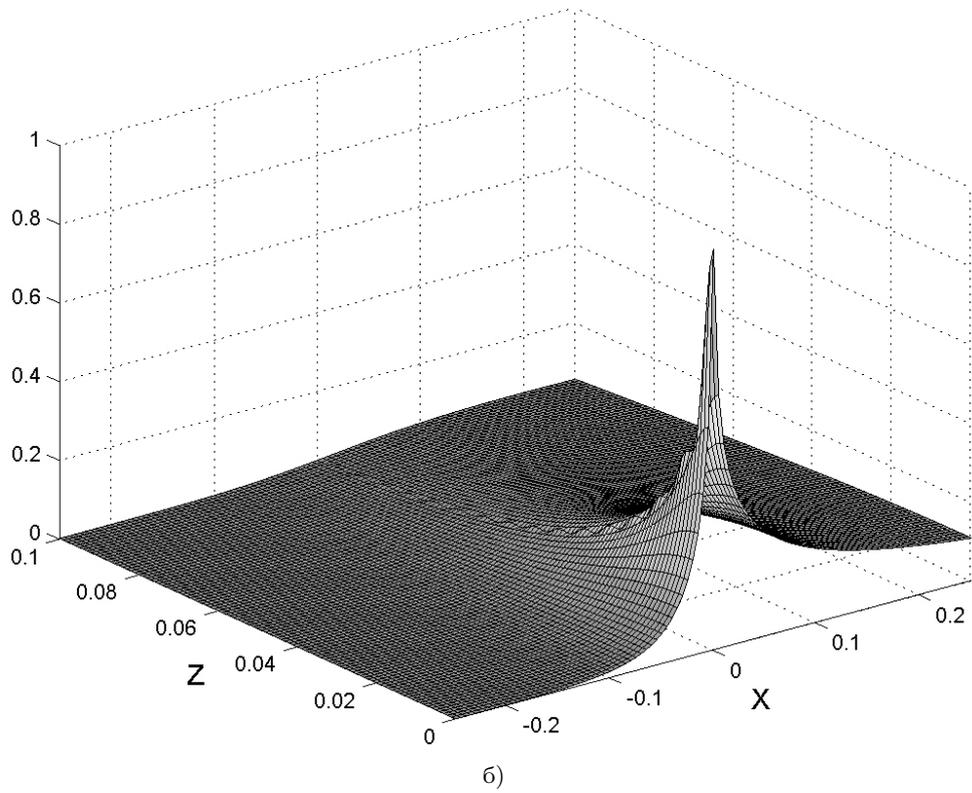
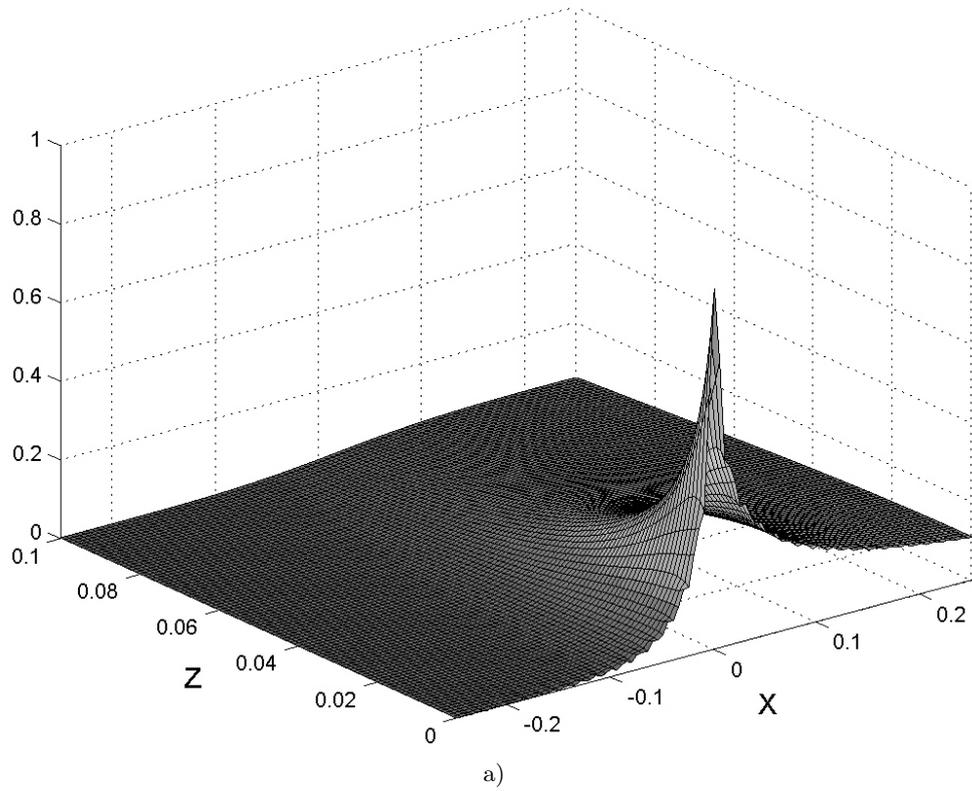


Рис. 1. Функция концентрации $\phi(x, z)$ для задачи (1.1)–(1.3): а) численный расчет интеграла (1.7), б) расчет интеграла (1.7) по вычетам. Параметры $u = 0,5$, $w = -0,05$, $\nu = 0,01$, $\mu = 0,02$, $\sigma = 0,01$

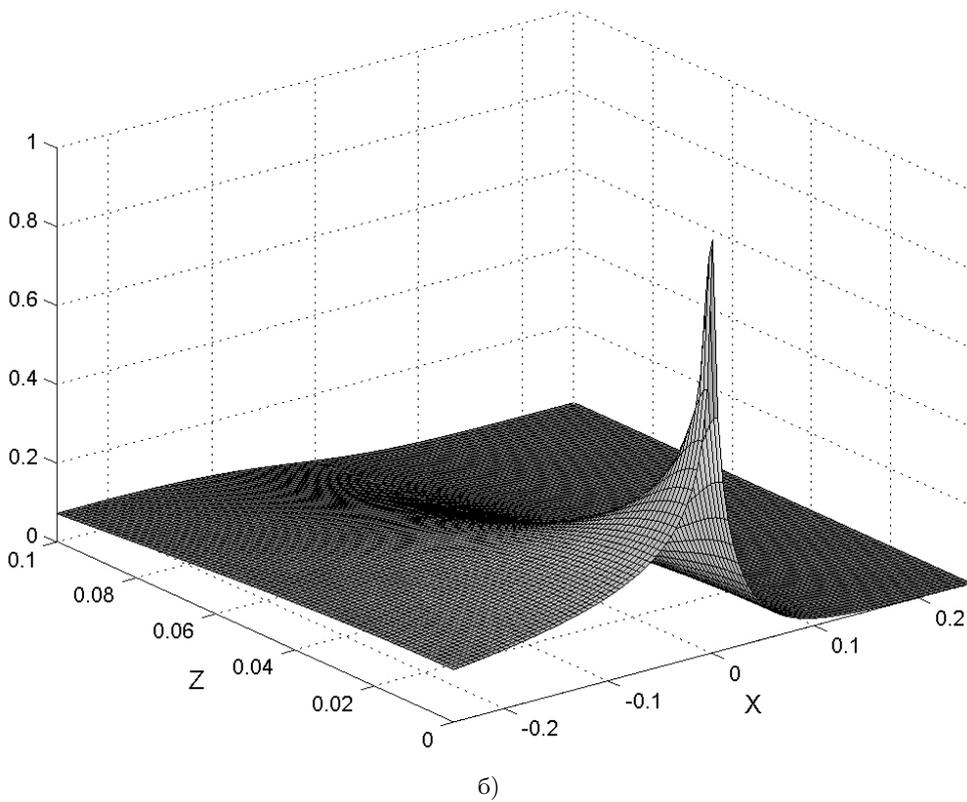
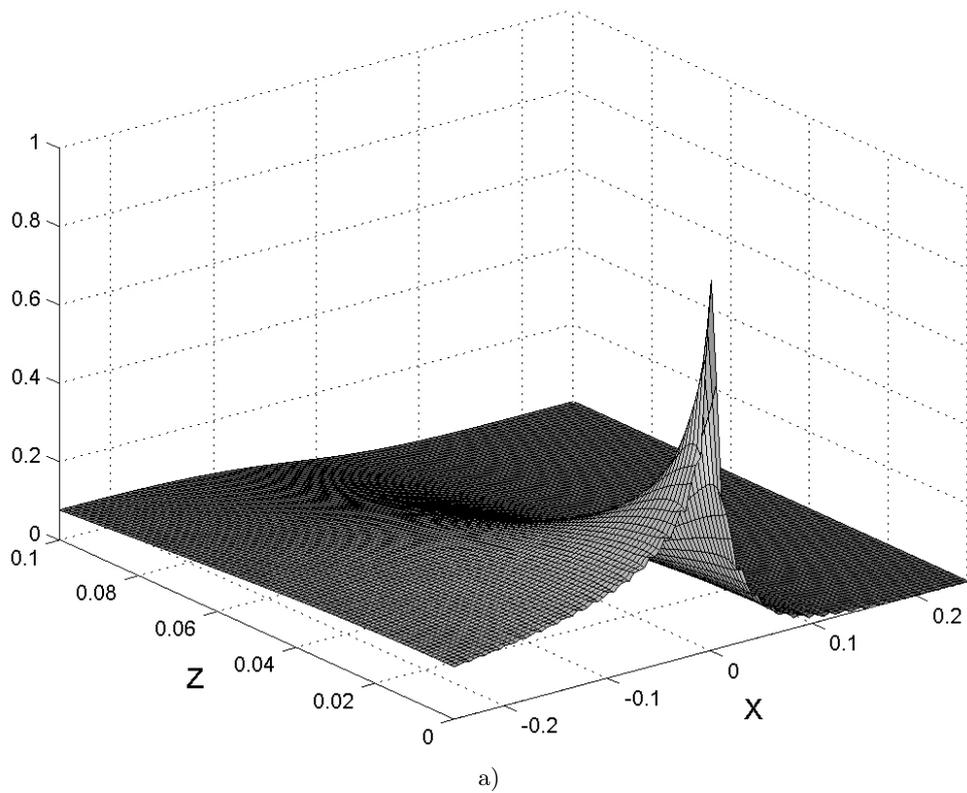


Рис. 2. Функция концентрации $\phi(x, z)$ для задачи (1.1)–(1.3): а) численный расчет интеграла (1.7), б) расчет интеграла (1.7) по вычетам. Параметры $u = -0,5$, $w = -0,02$, $\nu = 0,01$, $\mu = 0,02$, $\sigma = 0,01$

$$\omega(x, z) = 2\pi i \sum_k \operatorname{res} K(\alpha_k) e^{-i\alpha_k x},$$

$$\operatorname{res} K(\alpha_k) = \frac{1}{\Delta'(\alpha_k)} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} -e^{(\lambda_2(\alpha_k)h + \lambda_1(\alpha_k)z)} + \\ +e^{(\lambda_1(\alpha_k)h + \lambda_2(\alpha_k)z)} \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

Здесь α_k — однократные нули знаменателя Δ (2.5) — полюсы функции K (2.4). Производные $\Delta'(\alpha_k)$, соответствуют вычетам K в простых полюсах α_k . Величины α_k , $\Delta'(\alpha_k)$ находятся по формулам (3.15), (3.16), (3.20). Уравнение (3.14) легко решается численно с учетом начального приближения (3.18).

На рис. 1, 2 приведены по два варианта решения задачи (1.1)–(1.3) для различных значений параметров: рис. 1 соответствуют параметры $u = 0,5$, $w = -0,05$, $\nu = 0,01$, $\mu = 0,02$, $\sigma = 0,01$, рис. 2 $u = -0,5$, $w = -0,02$, $\nu = 0,01$, $\mu = 0,02$, $\sigma = 0,01$. На рис. 1а, 2а представлена функция концентрации $\phi(x, z)$, полученная с помощью численного расчета интеграла (1.7). На рис. 1б, 2б — расчеты по теории вычетов. В расчетах по теории вычетов использовалось по 10 полюсов в верхней и нижней комплексной полуплоскости. При численных расчетах требуемая относительная погрешность задавалась $\varepsilon = 10^{-3}$.

Как видно из приведенных рисунков, качественно данные двух способов расчета совпадают. Количественно в среднем относительные различия меньше 1 %, максимальные относительные различия не превышают 3 %. Наибольшие погрешности при численных расчетах наблюдаются для $z = 0$, при вычислениях по теории вычетов — в окрестности $x = 0$ (при $x = 0$ формула (4.1) неопределена). С увеличением числа вычетов и с увеличением требуемой точности интегрирования при прямом интегрировании средние и максимальные погрешности можно уменьшить на несколько порядков.

Заключение

Следует исходить из того, что без предварительного теоретического анализа любой численный метод, в том числе и рассматриваемый в данной работе, может давать большие погрешности, например, из-за отсутствия обоснованных значений тех параметров вычислительного алгоритма, которые определяются качественными свойствами решаемой задачи. В рассмотренном двумерном случае

точность расчетов в ближней и средней зоне в рамках каждого разработанного метода — численно-аналитического и численного — может значительно варьироваться в зависимости от параметров алгоритмов. Сопоставление результатов двух методов показало, что численное интегрирование дает приближение решения с необходимой точностью. В двумерном случае реализация аналитического способа относительно несложна, численный расчет интеграла Фурье существенно проще. В трехмерном случае двукратный интеграл Фурье (1.6) также может быть вычислен на основе теории вычетов [8], но с увеличением размерности использование теории вычетов приводит к гораздо более сложным формулам и численно-аналитическим алгоритмам. В трехмерном случае сравнение результатов численного интегрирования с расчетами из [8] продемонстрировало их хорошее качественное и количественное сходство.

Численное интегрирование в трехмерном случае реализуется так же просто, как и в двумерном, но время счета увеличивается по меньшей мере квадратично, примерно обратно пропорционально требуемой точности. На практике для инженерных и серийных научных расчетов аналогичных краевых задач диффузии использование алгоритмов интегрирования на основе формул Гаусса–Кронрода является обоснованным и более удобным, чем численно-аналитическое моделирование. Для научных исследований необходимы как численно-аналитические, так и численные методы.

Литература

1. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Численные методы решения задач конвекции-диффузии. М.: Книжный дом «Либроком», 2015. 248 с.
2. Самаров Ш.Ш. Точные и приближенные аналитические методы решения прямых, контактных и обратных задач теплопроводности. Автореф. дисс. ... канд. физ.-мат. наук. Душанбе. 2004. 20 с.
3. Бабешко В.А., Павлова А.В., Бабешко О.М., Евдокимова О.В. Математическое моделирование экологических процессов распространения загрязняющих веществ. Краснодар: КубГУ, 2009. 138 с.
4. Бекман И.Н. Высшая математика: математический аппарат диффузии. М.: Издательство Юрайт. 2018. 397 с.
5. Краснов М.Л., Киселев А.И., Макаренко Г.И. Функции комплексного переменного. 3 изд. М.: Физматлит. 2003. 208 с.

6. Международная библиотека математических подпрограмм IMSL. Режим доступа: <https://www.roguewave.com/products-services/imsl-numerical-libraries> (дата обращения: 15.08.2020).
7. Notaris S.E. An overview of results on the existence and nonexistence and the error term of Gauss–Kronrod quadrature formulas / R.V.M. Zahar (ed.), *Approximation and Computation*, Birkhäuser (1995). P. 485–496.
8. Кособуцкая Е.В. Некоторые модели распространения опасных загрязняющих веществ в стационарных условиях. Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. Краснодар.1998. 16 с.
9. Сыромьятников 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
4. Beckman, I.N. *Higher mathematics: the mathematical apparatus of diffusion*. Yurayt Publishing House, Moscow. 2018. (In Russian)
5. Krasnov, M.L., Kiselev, A.I., Makarenko, G.I. *Complex variable functions*. 3rd ed. Fizmatlit, Moscow, 2003. (In Russian)
6. International library of mathematical subroutines IMSL. Available at: <https://www.roguewave.com/products-services/imsl-numerical-libraries> (date accessed: 15.08.2020).
7. Notaris, S.E. An overview of results on the existence and nonexistence and the error term of Gauss – Kronrod quadrature formulas. In: Zahar R.V.M. (ed.) *Approximation and Computation*, Birkhäuser, 1995, pp. 485–496.
8. Kosobutskaya, E.V. *Some models of the spread of hazardous pollutants in stationary conditions*. Abstract ... cand. physical-mat. sciences, Krasnodar, 1998. (In Russian)
9. Syromyatnikov, P.V., Krivosheeva, M.A., Lapina, O.N., Nesterenko, A.G., Nikitin, Yu.G. Stationarnyye protsessy diffuzii-konveksii-raspada v odnorodnom poluprostranstve [Stationary diffusion-convection-decay processes in a homogeneous half-space]. *Ekologicheskii vestnik nauchnykh tsentrov Chernomorskogo ekonomicheskogo sotrudnichestva* [Ecological Bulletin of Research Centers of the Black Sea Economic Cooperation], 2019, vol. 16, no. 4, pp. 31–42. DOI: 10.31429/vestnik-16-4-31-42 (In Russian)

References

1. Samarsky, A.A., Vabishchevich, P.N. *Numerical methods for solving convection-diffusion problems*. Librokom, Moscow, 2015. (In Russian)
2. Samarov, Sh.Sh. *Exact and approximate analytical methods for solving direct, contact and inverse problems of heat conduction*. Abstract ... cand. physical-mat. sciences. Dushanbe. 2004. (In Russian)
3. Babeshko, V.A., Pavlova, A.V., Babeshko, O.M., Evdokimova, O.V. *Mathematical modeling of*