

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации**  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
**АМУРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**  
**(ФГБОУ ВО «АмГУ»)**

Факультет математики и информатики  
Кафедра математического анализа и моделирования  
Направление подготовки 01.04.02 Прикладная математика и информатика  
Направленность (профиль) образовательной программы Математическое  
и программное обеспечение вычислительных систем

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ  
И.о. зав. кафедрой  
\_\_\_\_\_ Н.Н. Максимова  
« \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2019 г.

**МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ**

на тему: Нелинейные модели диффузионных процессов переноса

Исполнитель  
студент группы 7520м

\_\_\_\_\_  
(подпись, дата)

А.А. Сысолятин

Руководитель  
доцент, канд. техн. наук

\_\_\_\_\_  
(подпись, дата)

Т.В. Труфанова

Руководитель научного  
содержания программы  
магистратуры

\_\_\_\_\_  
(подпись, дата)

А.Г. Масловская

Нормоконтроль  
старший преподаватель

\_\_\_\_\_  
(подпись, дата)

Л.И. Мороз

Рецензент  
доцент, канд. физ.-мат. наук

\_\_\_\_\_  
(подпись, дата)

В.В. Еремина

Благовещенск 2019

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации**  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
**АМУРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**  
**(ФГБОУ ВО «АмГУ»)**

Факультет математики и информатики  
Кафедра математического анализа и моделирования

УТВЕРЖДАЮ  
И.о. зав. кафедрой  
\_\_\_\_\_ Н.Н. Максимова  
« \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2019 г.

**З А Д А Н И Е**

К магистерской диссертации студента Сысолятина Алексея Александровича

1. Тема магистерской диссертации: Нелинейные модели диффузионных процессов переноса

(утверждена приказом от 04.02.2019 № 214 -уч)

2. Срок сдачи студентом законченной работы: 18.06.2019 г.

3. Исходные данные к магистерской диссертации: отчет о прохождении преддипломной практики, учебные и периодические научные издания, монографии.

4. Содержание магистерской диссертации (перечень подлежащих разработке вопросов): исследование процесса распространения продуктов сгорания ТЭЦ из трубы в атмосферу, разработка прикладной программы, предназначенной для установления закономерностей распространения газообразных и твердых примесей продуктов сгорания, в зависимости от параметров трубы, окружающей среды и продуктов сгорания.

5. Перечень материалов приложения: приложение.

6. Консультанты по магистерской диссертации: рецензент – Еремина В.В., доцент, канд. физ.-мат. наук, доцент; нормоконтроль – Мороз Л.И., старший преподаватель

7. Дата выдачи задания: 19.02.2019 г.

Руководитель магистерской диссертации: Труфанова Татьяна Вениаминовна, доцент, канд. техн. наук, доцент

Задание принял к исполнению (19.02.2019): \_\_\_\_\_ Сысолятин А.А.

## РЕФЕРАТ

Магистерская диссертация содержит 60 с., 15 рисунков, 2 приложения, 32 источника.

НЕЛИНЕЙНЫЕ МОДЕЛИ, КОНЦЕНТРАЦИЯ ПРИМЕСИ, ПРИЗЕМНЫЙ СЛОЙ АТМОСФЕРЫ, ПЕРЕНОС ВЕЩЕСТВ, ДИФфуЗИОННЫЙ ПРОЦЕСС, ПРОДУКТЫ СГОРАНИЯ, ГАУССОВА МОДЕЛЬ, ЭКОЛОГИЧЕСКОЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЕ, ТОЧЕЧНЫЙ ТЕПЛОВОЙ ИСТОЧНИК, КОНВЕКЦИЯ, ДИФфуЗИЯ

В работе исследован процесс выброса вредных веществ в окружающую среду.

Целью магистерской диссертации является численное решение задачи рассеивания газообразных и твердых продуктов сгорания в приземном слое атмосферы.

Научная новизна данной работы заключается в следующем: разработка прикладной программы на выбранном языке программирования, предназначенной для выявления закономерностей распространения газообразных и твердых частиц продуктов сгорания, учитывая особенности трубы, окружающей среды и продуктов сгорания.

Научная и практическая значимость магистерской диссертации: математическое моделирование процесса распространения продуктов сгорания ТЭЦ из трубы в окружающую среду может активно использоваться при решении широкого класса экологических задач. Результаты вычислений могут быть использованы при проектировании промышленных и жилых объектов с целью уменьшения вреда для населения и окружающей среды в целом; численные решения могут быть использованы при проведении протоколов испытаний для АО

«Дальневосточная генерирующая компания» и при преподавании дисциплин по прикладной математике.

Апробация результатов исследования: основные результаты работы были апробированы и докладывались на Российской национальной конференции «Современные проблемы науки» (Благовещенск, АмГУ, 2017), региональной научно-практической конференции «Молодежь XXI века: шаг в будущее» (Благовещенск, АмГУ, 2018,2019). Основные положения исследования опубликованы в трех работах (в одной статье и в двух тезисах докладов).

## СОДЕРЖАНИЕ

Введение	6
1 Обзор и анализ математических моделей процессов диффузии и конвекции	11
1.1 Математические модели переноса загрязняющих веществ	12
1.1.1 Гауссова модель рассеивания примеси	12
1.1.2 Модель турбулентной диффузии	14
1.1.3 Модель Пасквилла-Бригса	15
1.1.4 Модель безинерционных частиц	15
1.2 Нестационарные диффузионно-кинетические процессы	16
1.3 Аналитическое решение нелинейной системы уравнений диффузионного процесса	19
1.3.1 Математическая постановка задачи	19
1.3.2 Использование возможностей ППП MatLab для решения одномерных квазилинейных уравнений	23
2 Численные методы и средства программной реализации	27
2.1 Пакет прикладных программ MatLab	28
2.2 Мультифизический пакет COMSOL	29
2.3 Метод расщепления	31
3 Численные решение задачи распространения продуктов сгорания теплоэлектроцентрали в атмосфере	34
3.1 Общая характеристика предприятия	34
3.2 Численное решение нестационарной задачи рассеивания активной примеси	36
Заключение	48
Библиографический список	49
Приложение А Листинг реализации алгоритма	53
Приложение Б Листинг реализации алгоритма	55

## ВВЕДЕНИЕ

В магистерской диссертации исследуется актуальная задача о распространении продуктов сгорания источниками загрязнения в окружающую среду. Актуальность работы обусловлена тем, что продукты сгорания, выходящие из трубы, представляют собой смесь газового потока, т.е. оксиды углерода, оксиды и диоксиды азота, сернистый ангидрид, которая является экологически опасными для состояния атмосферы и здоровья населения.

Основным объектом воздействия указанных частиц является окружающая среда. Заметим, что исследования в данной отрасли проводятся очень давно. Главным инструментом исследования считалось экспериментальное моделирование в аэродинамической трубе [1]. Отметим, что вычислительные возможности техники до 90-тых годов прошлого века были развиты относительно слабо, единственно возможным средством для проведения исследований в данной отрасли являлось моделирование. В аэродинамическую трубу помещен источник выбросов. Перенос веществ представлял собой смесь радиоактивных изотопов соединений, присутствующих в реальном выбросе веществ. Исследования проходят в стационарном режиме, некоторый промежуток времени. Затем определяется количество радиации, которое считается так называемым, показателем уровня загрязнений в определенной точке пространства. Анализируя данные статистики, по результатам эксперимента получен класс полуэмпирических формул, которые применялись как при проектировании новых технических сооружений, являющихся источниками выброса опасных частиц, так и при оценке уровня загрязнения веществами от уже существующих источников. Полученные результаты актуальны при решении неоднозначных эколого-правовых ситуаций, например, установление вклада определенного предприятия в указанной точке пространства. Отметим, что в указанной точке пространства может происходить суммирование вредоносных выбросов нескольких предприятий. Измеряется итоговое значение, а определить вклад определенного предприятия невозможно.

Вышеизложенная методика демонстрировала неплохие для своего времени результаты. Изложим минусы данной методики. Во-первых, сложно учесть воздействие погодных и климатических условий. Данный подход значительно усложняет методику расчётов и является причиной больших отклонений значений от реальных. Во-вторых, трудно рассмотреть для каждого случая влияние рельефа на распространение вредных веществ. В-третьих, воздушная среда представляет собой открытую систему в отличие от аэродинамической трубы, чем обусловлен более сложный характер турбулентности [2]. В результате, в действительности выброс газового потока распространяется немного иначе, чем при моделировании данного процесса.

Поэтому целесообразно применять более совершенные модели для моделирования данного процесса. Учитывая рост эффективности и возможностей вычислительной техники, стало допустимым численное моделирование процесса распространения продуктов сгорания ТЭЦ из трубы в окружающую среду. Для того, чтобы выбрать адекватную математическую модель, необходимо учесть большое количество факторов, происходящих в реальных условиях и влияющих на процесс трассировки газового потока, таких как опасная скорость ветра, смены направления ветра и т.д.

Математическое моделирование процесса распространения активных примесей из теплового точечного источника сводится к вычислению задачи движения затопленной струи [2]. Вопрос моделирования движения затопленной струи рассматривается длительное время. Решение данной задачи следует искать в двумерной постановке, но только для небольшого класса задач. Поведение затопленной струи в окружающей среде является задачей в трёхмерной постановке.

Беря во внимание, что дымовые газы исходящие из трубы теплоэлектроцентрали имеют твёрдые молекулы в небольших концентрациях, поэтому продукты сгорания можно определенно считать однофазными (газообразными).

Актуальность магистерской диссертации: процесс распространения газового потока от источника загрязнения в приземном слое атмосфере рассмотрен

в большом объёме с инженерной точки зрения. Вычисление максимальных концентраций газового потока возможно с применением конкретного класса формул. Эти формулы актуальны в вычислениях, связанных с разрешением проблем экологического рода. Входными данными для вычислений являются скорость и направление ветра; природа вещества, выбрасываемого в атмосферу; температура и давление окружающей среды и продуктов сгорания; температура и скорость газового потока, тепловая мощность источника загрязнения и характерные параметры; время года.

Однако, невзирая на актуальность искомого физического процесса, математическое моделирование его развито относительно слабо. Вычислительные формулы носят полуэмпирический смысл. Как было указано выше, формулы для расчёта значимых характеристик загрязнения атмосферы продуктами сгорания, были получены для модельной задачи. При использовании формул для широкого перечня подобных задач, стало возможным использование ряда поправочных коэффициентов. В результате, это усложнило вычислительный процесс. Поправочные коэффициенты были найдены в модельных условиях, при решении ряда задач, что снижает их практическую значимость. Также недостатком методики можно считать грубое моделирование процессов физических явлений. Исследование алгоритмов численного моделирования применяемых на практике и определяет актуальность темы данной магистерской диссертации.

Целью магистерской диссертации является численное решение задачи рассеивания газообразных и твердых продуктов сгорания в приземном слое атмосферы.

Для достижения поставленной цели выполнялись следующие действия:

- обзор и анализ известных математических моделей процесса диффузии и конвекции;
- формулировка математической постановки задачи диссертационного исследования, отвечающая требованиям корректности;
- численное решение уравнения турбулентной диффузии;

- разработка прикладной программы на выбранном языке программирования, предназначенной для выявления закономерностей распространения газообразных и твердых частиц продуктов сгорания, учитывая особенности трубы, окружающей среды и продуктов сгорания;

- проведение вычислительных экспериментов и анализ результатов моделирования.

Объект исследования – математические модели процессов диффузии и конвекции.

Предмет исследования – процесс рассеивания активной примеси в атмосфере.

Гипотеза исследования: можно численно реализовать математическую модель рассеивания примеси в атмосфере, в которой для описания процесса используется уравнение турбулентной диффузии.

Научная новизна работы: разработана прикладная программа, предназначенная для выявления закономерностей распространения газообразных и твердых частиц продуктов сгорания от источника загрязнения, учитывая особенности трубы, окружающей среды и продуктов сгорания.

Научная и практическая значимость магистерской диссертации: математическое моделирование процесса распространения продуктов сгорания теплоэлектроцентрали из трубы в окружающую среду может активно использоваться при решении широкого класса экологических задач. Результаты вычислений могут быть использованы при проектировании промышленных и жилых объектов с целью уменьшения вреда для населения и окружающей среды в целом; численные решения могут быть использованы при проведении протоколов испытаний для АО «Дальневосточная генерирующая компания» и при преподавании дисциплин по прикладной математике [3].

Апробация результатов исследования: основные результаты работы докладывались на Российской национальной конференции «Современные проблемы науки» (Благовещенск, АмГУ, 2017), региональной научно-практической конференции «Молодежь XXI века: шаг в будущее» (Благове-

щенск, АмГУ, 2018,2019). Основные положения исследования опубликованы в трех работах (в одной статье и в двух тезисах докладов).

В работе рассмотрены нелинейные модели диффузионных и конвективных процессов переноса.

Работа состоит из трех глав.

В первой главе проведен обзор и анализ известных математических моделей процессов диффузии и конвекции. Изложено решение одномерной краевой задачи для квазилинейного уравнения, методом *прямых* [4]. Был реализован алгоритм поиска коэффициентов Фурье для двухкомпонентной среды в ППП *MatLab*. Также проведено тестирование программы с варьированием параметров и анализ полученных результатов.

Во второй главе описаны средства программной реализации, используемые в работе. Также приведены и описаны численные методы, используемые для решения уравнения турбулентной диффузии.

В третьей главе изложено численное решение уравнения турбулентной диффузии. Приведены результаты разработанной прикладной программы в *COMSOL Multyphysics*, предназначенная для выявления закономерностей распространения газообразных и твердых частиц продуктов сгорания от источника загрязнения, учитывая особенности трубы, окружающей среды и продуктов сгорания.

# 1 ОБЗОР И АНАЛИЗ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ПРОЦЕССОВ ДИФФУЗИИ И КОНВЕКЦИИ

Одной из основных проблем экологии является распространение вредных веществ в атмосфере. В настоящее время, для большинства крупных городов свойственно сильное загрязнение воздушной среды, т.к. объемы выбросов химических частиц очень велики. При моделировании процесса распространения загрязнений следует учитывать разновидность тепловых источников выбросов.

Точечный стационарный источник выбросов – это источник, расположенный на определенной территории и выбрасывающий загрязняющие частицы из отверстия в атмосферу. Для городов такими источниками являются дымовые трубы некоторых заводов, теплоэлектростанций, котельные, вытяжки и другие. Стационарные источники загрязнения выбрасывают оксиды и диоксиды азота, сернистый ангидрид, угарный газ и другие частицы вредных веществ в зависимости от используемого сырья и от вида деятельности предприятия. В данном случае, выброс вредных веществ, происходит на большой высоте, вследствие чего, молекулы вредных веществ распространяются на большой территории. Масштаб загрязнения зависит от времени существования и распада вредных веществ в атмосфере, от скорости и направления ветра, от количества осадков и множества других процессов. Распространение загрязнений воздушной среды автотранспортом происходит на небольшой высоте, в отличие, от точечных стационарных источников загрязнений.

При моделировании процесса переноса концентрации загрязняющего вещества, в воздушной среде, модели разбивают на несколько классов:

- модели рассеивания активных примесей в приземном слое атмосферы (используются для оценки, прогноза распределения и изменения концентрации загрязнения во времени);

- модели загрязнения воздушной среды.

Распространение продуктов сгорания теплоэлектростанции в атмосфере связано с физическими и химическими процессами переноса активной примеси.

Диффузия является одним из способов переноса примеси в воздушной среде. Диффузия – это процесс, способствующий равномерному распределению концентрации в областях термодинамически однородной среды [5]. Существуют две разновидности диффузии: молекулярная и турбулентная [6]. Молекулярная диффузия сопровождается хаотичным движением частиц, в отличие от турбулентной диффузии, где движение происходит сложными вихревыми потоками. Обычно в задачах переноса примеси в окружающей среде под коэффициентом диффузии понимают коэффициент турбулентной диффузии, так как значения молекулярной диффузии во много раз меньше значений турбулентной диффузии. Другим способом переноса примеси в воздушной среде является конвекция [7]. Конвекция – это процесс передачи тепла, при котором внутренняя энергия передается потоками.

К процессам переноса диффузии и конвекции можно отнести такие процессы, в которых возникновение массы или потоков энергии связано с движением частиц, участвующих в хаотичном тепловом движении. Перенос массы или энергии в подвижной среде следует исследовать с учетом конвективного переноса. В математических моделях процессов переноса диффузии и конвекции содержатся фундаментальные законы сохранения энергии и массы.

### **1.1 Математические модели переноса загрязняющих веществ**

Модели процесса переноса загрязняющего вещества моделируют во времени пространственное распределение выбросов активной примеси вредных веществ.

#### **1.1.1 Гауссова модель рассеивания примеси.**

В основе Гауссовой модели лежит Гауссово распределение [8]. Для вычисления средних значений концентрации активной примеси в расчетной области пользуются данной моделью. Особенность данной модели заключается в том, что турбулентность считается везде одинаковой, постоянная скорость ветра и движение потоков не влияет на направление ветра. Кроме того, модель подразумевает однородность и устойчивость атмосферы. Для нестационарного случая Гауссова модель может быть представлена в следующем виде:

$$u(x, y, z, t) = \frac{q}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp\left[-\frac{((x - x_0) - vt)^2}{2\sigma_x^2}\right] \cdot \exp\left[-\frac{(y - y_0)^2}{2\sigma_y^2}\right] \cdot \left( \exp\left[-\frac{(z - h)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z + h)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right), \quad (1)$$

$$\text{где } \sigma_x^2 = \frac{2}{h} \int_0^h D_x(z) dz; \sigma_y^2 = \frac{2}{h} \int_0^h D_y(z) dz; \sigma_z^2 = \frac{2}{h} \int_0^h D_z(z) dz;$$

$D_x, D_y, D_z$  [м<sup>2</sup>/с] – коэффициенты турбулентной диффузии в направлении координатных осей;

$q$  [г/с] – мощность источника;

$u(x, y, z, t)$  – концентрация загрязняющего вещества;

$v$  [м/с] – скорость ветра на высоте  $h$ ;

$h$  [м] – высота источника загрязнения;

$t$  [с] – время трассировки;

$\sigma_x, \sigma_y$  – горизонтальные дисперсии;

$\sigma_z$  – вертикальная дисперсия;

$x_0, y_0, h$  – координаты источника загрязнения.

Реализация данной модели происходит при следующих условиях: выброс загрязняющих веществ должен быть постоянным и равномерным; диффузией по направлению ветра можно пренебречь; направление ветра и дисперсии являются постоянными.

Гауссова модель рассеивания примеси используется для прогнозирования распространения выбросов загрязнения воздуха надземными источниками. Гауссова модель позволяет описывать распределение загрязняющего вещества в горизонтальном направлении, для расчета вертикального направления, данная модель применима для коротких расстояний. Из недостатков модели можно выделить следующие: не описывает работу источников распространения загрязнений работающих неограниченное время и не учитывает рельеф поверхности.

Гауссова модель рассеивания примеси для стационарного случая может быть представлена в виде [9]:

$$u(x, y, z) = \frac{q}{2\pi v \sigma_y \sigma_z} \exp\left(\frac{-y^2}{\sigma_y^2}\right) \left[ \exp\left(\frac{-(z-h)^2}{\sigma_z^2}\right) + \exp\left(\frac{-(z+h)^2}{\sigma_z^2}\right) \right].$$

Существует большое множество моделей рассеивания примеси, основанных на модели Гаусса:

- модель для единственного источника – для единственного точечного источника определяется два наивысших значения концентрации в различные периоды времени;

- климатологическая модель – модель расчета концентраций вредных веществ непрерывной струи;

- гауссова модель качества воздуха для множества источников – расчет концентрации пассивной примеси из нескольких источников загрязнения.

Все разновидности Гауссовой модели отличаются своими приложениями, а не общими способами расчета концентрации.

### 1.1.2 Модель турбулентной диффузии.

Модель турбулентной диффузии при исследовании включает в себя множество факторов, определяющих процесс рассеивания активной примеси. В основе данной модели лежит уравнение неразрывности [10].

Модель турбулентной диффузии описывается следующим уравнением:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} v_x u + \frac{\partial}{\partial y} v_y u + \frac{\partial}{\partial z} v_z u = \frac{\partial}{\partial x} D_x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} D_y \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} D_z \frac{\partial u}{\partial z} \quad (2)$$

с граничным условием  $D_z \frac{\partial u}{\partial z} + v_z u = \beta u$ ,

где  $v_x$ [м/с] – средняя скорость ветра вдоль оси  $x$ ;

$v_y$ [м/с] – средняя скорость ветра вдоль оси  $y$ ;

$v_z$ [м/с] – средняя скорость частиц загрязняющего вещества;

$\beta$  [м/с] – постоянная.

В данном случае, зависимость концентрации загрязняющего вещества от расстояния до точечного источника носит гиперболический характер.

Особое внимание уделяется коэффициентам турбулентной диффузии, так как они оказывают большое влияние на распространение вредных веществ в воздушной среде. Для нахождения коэффициентов  $D_x$  и  $D_y$  можно воспользоваться следующим соотношением:

$$D_x \approx D_y = D_0 v_x.$$

Коэффициент  $D_0$  можно определить, вычислив  $D_x$  и  $v_x$  на границе приземного слоя эмпирически или найти решение обратного уравнения турбулентной диффузии [11]. До сих пор, определение коэффициентов турбулентной диффузии остается трудной задачей, так как коэффициенты существенно зависят от множества параметров атмосферы: давления, температуры и другие. Аналитические решения модели (2) считаются трудоемкой задачей.

### 1.1.3 Модель Пасквилла – Бригса.

Модель Пасквилла – Бригса является эмпирической моделью и используется международным агентством по атомной энергии (МАГАТЭ).

Дисперсии можно задать в следующем виде:

$$\sigma_y = p_1 x (1 + q_1 x)^{-0.5},$$

$$\sigma_z = p_2 x (1 + q_2 x)^{-1}$$

$p_i, q_i$  – задаются таблично для каждого класса устойчивости атмосферы [12].

Для расстояний от 100 м до 10 км:

$$\sigma_y = \frac{\alpha_x x}{\sqrt{1 + 10^{-4} x}},$$

$$\sigma_z = \frac{\alpha_z x}{s_z(x)}$$

Алгоритм реализации данной модели на ЭВМ очень простой и занимает небольшой промежуток времени.

### 1.1.4 Модель безинерционных частиц.

Модель актуальна для небольших концентраций вредных веществ и описывается уравнением:

$$\frac{\overline{\partial \rho u_\beta w_i}}{\partial x_i} - \rho v_t \frac{\overline{\partial u_\beta}}{\partial x_3} = 0,$$

где  $u_\beta$  – концентрация;

$\rho$  – плотность частиц;

$w_i$  – составляющие вектора скорости;

$v_t$  – скорость оседания частиц, которая определяется по формуле:

$$v_t = \frac{\rho_\beta d^2 g}{18\mu},$$

где  $d$  – диаметр частицы;

$g$  – ускорение свободного падения;

$\mu$  – турбулентная динамическая вязкость.

Частицы загрязняющего вещества двигаются с одинаковой скоростью с окружающим воздухом, плотность частиц в разы превышает плотность воздуха.

## 1.2 Нестационарные диффузионно-кинетические процессы

Моделирование некоторых процессов в физических, химических и биологических системах способствует построению решения краевых задач для системы одномерных квазилинейных уравнений:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = \operatorname{div} \left( \sum_{j=1}^n D_{ij} \operatorname{grad} u_j \right) + f_i(u_1, u_2, \dots, u_n, M, t), \quad (3)$$

где  $i = 1, 2, \dots, n; t > 0; M \in \mathfrak{R}^N; N = 1, 2, 3; D_{ij}$  – коэффициенты взаимной ( $i \neq j$ ) и собственной ( $i = j$ ) диффузии.

Такие уравнения описывают нестационарные диффузионно-кинетические процессы в многокомпонентных распределенных системах, т.е. развитие большого ряда нелинейных систем с диффузией. Математические модели, основывающиеся на уравнениях типа (3), широко используются в различных отраслях экологии, биологии, экономике [12] и другие.

Для описания процессов типа «реакция-диффузия» в химической кинетике, часто используют системы уравнений вида (3). Младшие члены уравнений показывают взаимодействие  $n$  компонентов системы со скоростью, зависящей

от концентрации компонентов. Приведем пример функции  $f_i$ , описывающей кинетику процессов

$$f_i = k_i u_1^{\alpha_{i1}} u_2^{\alpha_{i2}} \dots u_n^{\alpha_{in}}, a_{ij} = \text{const} > 0. \quad (4)$$

где  $k_i = \text{const}$ ;  $a_{ij}$  – стехиометрические коэффициенты ( $\alpha_{11} = \alpha_{12} = \alpha_{21} = \alpha_{22}$ ).

Так определяются скорости кинетических реакций по закону действующих масс, через концентрации реагирующих веществ.

Точные решения задач для общего случая уравнений (3) получить не удастся из-за нелинейности, обусловленной младшими членами уравнений. Требуется найти решение нелинейной системы уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\partial u_1}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} + k u_1 u_2; \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} - k u_1 u_2, \end{cases} \quad (5)$$

где  $D_{ij}$  – коэффициент диффузии ( $D_1 = D_2 = D > 0$ );

$k_j$  – скорость кинетической реакции ( $k_1 = -k_2 = k > 0$ );

$u_i$  – нестационарное поле объемной концентрации диффундирующего вещества.

Найдем точное аналитическое решение нелинейной системы в области  $\mathfrak{R}_+^2 = \{(x, t) : -\infty < x < +\infty, t > 0\}$ . Полученное решение соответствует волнам концентраций со стационарными профилями, распространяющимися с одинаковой скоростью.

Решение системы уравнений (5) ищем в виде  $u_1 = u_1(\xi)$  и  $u_2 = u_2(\xi)$ , где  $\xi = x + vt, v = \text{const} > 0$ . Далее система уравнений (5) преобразуется к следующему виду

$$\begin{cases} v \frac{du_1}{d\xi} - D \frac{d^2 u_1}{d\xi^2} = k u_1 u_2; \\ v \frac{du_2}{d\xi} - D \frac{d^2 u_2}{d\xi^2} = -k u_1 u_2. \end{cases} \quad (6)$$

В исследуемой области  $-\infty < \xi < +\infty$  рассмотрим функцию

$$\gamma(\xi) = \left( \frac{e^{\alpha\xi}}{1 + e^{\alpha\xi}} \right)^2 \equiv \left( \frac{1 + \operatorname{th} \frac{\alpha\xi}{2}}{2} \right)^2, \quad (7)$$

обусловленную параметром  $\alpha = \operatorname{const} > 0$ .

$$\begin{aligned} \frac{d\gamma}{d\xi} &= 2 \frac{e^{\alpha\xi}}{1 + e^{\alpha\xi}} \left( \frac{\alpha e^{\alpha\xi} (1 + e^{\alpha\xi}) - e^{\alpha\xi} \alpha e^{\alpha\xi}}{(1 + e^{\alpha\xi})^2} \right) = 2 \frac{e^{\alpha\xi}}{1 + e^{\alpha\xi}} \frac{\alpha e^{\alpha\xi}}{(1 + e^{\alpha\xi})^2} = 2 \frac{(e^{\alpha\xi})^2}{(1 + e^{\alpha\xi})^2 (1 + e^{\alpha\xi})} \\ \frac{d\gamma}{d\xi} &= -2\alpha\gamma \left( \gamma^{\frac{1}{2}} - 1 \right) \end{aligned} \quad (8)$$

$$\text{где } \gamma^{\frac{1}{2}} - 1 = \frac{l^{\alpha\xi}}{1 + l^{\alpha\xi}} - 1 = -\frac{1}{1 + l^{\alpha\xi}}.$$

Далее, упрощаем полученное выражение

$$\begin{aligned} \frac{d^2\gamma}{d\xi^2} &= -2\alpha \left[ -2\alpha\gamma \left( \gamma^{\frac{1}{2}} - 1 \right)^2 + \gamma \frac{1}{2} \gamma^{-\frac{1}{2}} \left( \gamma^{\frac{1}{2}} - 1 \right) (-2\alpha\gamma) \right] = \\ &= 4\alpha^2\gamma \left( \gamma - 2\gamma^{\frac{1}{2}} + 1 + \frac{1}{2} \gamma \frac{1}{2} \left( \gamma^{\frac{1}{2}} - 1 \right) \right) \end{aligned}$$

и получаем упрощенное выражение

$$4\alpha^2\gamma \left( \gamma - 2\gamma^{\frac{1}{2}} + 1 + \frac{1}{2} \gamma - \frac{1}{2} \gamma^{\frac{1}{2}} \right) = 4\alpha^2\gamma \left( \frac{3}{2} \gamma - \frac{5}{2} \gamma^{\frac{1}{2}} + 1 \right) = 4\alpha^2\gamma \frac{3}{2} \left( \gamma - \frac{5}{3} \gamma^{\frac{1}{2}} + \frac{2}{3} \right)$$

Таким образом

$$\frac{d^2\gamma}{d\xi^2} = 6\alpha^2\gamma \left( \gamma^{\frac{1}{2}} - 1 \right) \left( \gamma^{\frac{1}{2}} - \frac{2}{3} \right). \quad (9)$$

Следовательно,

$$v \frac{d\gamma}{d\xi} - D \frac{d^2\gamma}{d\xi^2} = v \left( -2\alpha\gamma \left( \gamma^{\frac{1}{2}} - 1 \right) \right) - D \left[ 6\alpha^2\gamma \left( \gamma^{\frac{1}{2}} - 1 \right) \left( \gamma^{\frac{1}{2}} - \frac{2}{3} \right) \right]$$

Преобразуем правую часть полученного равенства

$$v \frac{d\gamma}{d\xi} - D \frac{d^2\gamma}{d\xi^2} = -2\alpha\gamma \left( \gamma^{\frac{1}{2}} - 1 \right) \left[ v + 3D\alpha \left( \gamma^{\frac{1}{2}} - \frac{2}{3} \right) \right] = 6\alpha^2\gamma D \left( 1 - \gamma^{\frac{1}{2}} \right) \left( \frac{v}{3\alpha D} + \gamma^{\frac{1}{2}} - \frac{2}{3} \right)$$

или

$$v \frac{d\gamma}{d\xi} - D \frac{d^2\gamma}{d\xi^2} = 6\alpha^2 D \gamma \left(1 - \gamma^2\right) \left(A + \gamma^2\right), \quad (10)$$

где  $A = \frac{v}{3\alpha D} - \frac{2}{3}$ .

Выбираем параметр  $v$ , определяющий скорость волн, равным  $v = 5\alpha D$ , тогда получаем  $A = 1$  и

$$v \frac{d\gamma}{d\xi} - D \frac{d^2\gamma}{d\xi^2} = 6\alpha^2 D \gamma (1 - \gamma). \quad (11)$$

Из полученного выражения можно сделать вывод, что если  $\alpha$  выбрать из условия  $6\alpha^2 D = k$ , т.е. считать, что  $\alpha = \sqrt{k/(6D)}$  и  $v = 5\sqrt{kD/6}$ , тогда система уравнений (6) имеет решение  $u_1 = \gamma(\xi)$  и  $u_2 = 1 - \gamma(\xi)$ .

Вернувшись к переменным  $x$  и  $t$ , запишем полученное решение системы уравнений «реакция-диффузия» (5) в следующем виде

$$u_1(x, t) = \frac{1}{4} \left[ 1 + th \sqrt{\frac{k}{24D}} \left( x + 5 \sqrt{\frac{kD}{6}} t \right) \right]^2; \quad (12)$$

$$u_2(x, t) = 1 - u_1(x, t).$$

Полученное решение системы уравнений (5) описывает стационарные волны концентраций компонентов, распространяющиеся с постоянной скоростью  $v = 5\sqrt{kD/6}$ . Вместе с тем, пространственная область, для первого вещества, увеличивается, а область, для второго вещества, – уменьшается. Данное утверждение сочетается с физической моделью процесса (3), т.к. кинетика данного процесса говорит о том, что при взаимодействии компонент происходит рождение первой компоненты и уничтожение второй.

### 1.3 Аналитическое решение нелинейной системы уравнений диффузионного процесса

#### 1.3.1 Математическая постановка задачи.

Требуется найти решение системы  $n$  одномерных квазилинейных уравнений (13):

$$\begin{aligned}\frac{\partial u_1}{\partial t} &= D_1 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} + f_1(u_1, u_2, \dots, u_n, x, t); \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} &= D_2 \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} + f_2(u_1, u_2, \dots, u_n, x, t); \\ \frac{\partial u_n}{\partial t} &= D_n \frac{\partial^2 u_n}{\partial x^2} + f_n(u_1, u_2, \dots, u_n, x, t),\end{aligned}\tag{13}$$

с начальными условиями:

$$u_i(x, 0) = U_i(x), 0 \leq x \leq l, i = 1, 2, \dots, n,\tag{14}$$

и граничными условиями:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u_1}{\partial x} = \frac{\partial u_2}{\partial x} = \dots = \frac{\partial u_n}{\partial x} &= 0, x = 0; \\ \frac{\partial u_1}{\partial x} = \frac{\partial u_2}{\partial x} = \dots = \frac{\partial u_n}{\partial x} &= 0, x = l.\end{aligned}\tag{15}$$

Выражения (13)–(15) следует исследовать как задачу, моделирующую нестационарный процесс в химическом реакторе с непроницаемыми стенками. Приближенное решение исходной задачи находим, проведя дискретизацию системы квазилинейных уравнений (13) по временному переменному. Переход к конечным разностям в уравнении по одному переменному называют *методом Рунге* [13], или *методом прямых*.

Не учитывая оценку погрешности используемого метода и доказательство сходимости, представим схему для построения алгоритма приближенного аналитического решения системы уравнений (13)–(15). Реализация *метода прямых*: проводим замену оператора дифференцирования разностным отношением, по временному переменному, считая, что

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = \frac{u(x, t_k) - u(x, t_{k-1})}{\tau} + O(\tau).\tag{16}$$

Далее подставляем соотношение (16) в систему уравнений (13) и не беря во внимание члены более высокого порядка малости, находим полудискретное подобие задачи (13)–(15) в виде набора ( $k=1, 2, \dots$ ) уравнений, соединяющих искомую функцию, аргументы и ее производные для  $i=1, 2, \dots, n$ :

$$\frac{u(x, t_k) - u(x, t_{k-1})}{\tau} + O(\tau) = D_1 \frac{d^2 u_1}{dx^2} + f_1(u_1, u_2, \dots, u_n, x, t).$$

В общем профиле описывается соотношением:

$$D_i \frac{d^2 u_i^{(k)}}{dx^2} - \tau^{-1} u_i^{(k)}(x) = \tau^{-1} u_i^{(k-1)}(x) - F_i^{(k)}(x), \quad (17)$$

с граничными условиями

$$\left. \frac{du_i^{(k)}}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{du_i^{(k)}}{dx} \right|_{x=l} = 0. \quad (18)$$

Значения функций  $u_1, u_2, \dots, u_n$ , на каждом временном слое в младших членах  $f_i$  в соотношении (13), взяты с предыдущего временного слоя, т.е.

$$F_i^{(k)}(x) = f_i(u_1^{(k-1)}(x), u_2^{(k-1)}(x), \dots, u_n^{(k-1)}(x), x, t_{k-1}).$$

Действительно, можно последовательно вычислить функции  $u_i^{(k)}(x)$  для  $k=1, 2, \dots$ , с помощью выражения (17) с учетом граничных условий (18). Данные функции являются приближениями искомых решений  $u_i(x, t)$  задачи (13)–(15) на временных слоях  $t = t_k$ . При вычислении  $F_i^{(1)}(x)$ , изначально, в качестве  $u_i^0(x)$  требуется взять начальные распределения  $U_i(x)$ .

Согласно методу Фурье, будем искать нетривиальные решения уравнения, удовлетворяющие граничным условиям (18) в виде

$$u = X(x)T(t).$$

Данное соотношение преобразуем в следующий вид

$$X(x)T'(t) = a^2 X''(x)T(t),$$

и поделим выражение на  $a^2 X(x)T(t)$ ,

$$\frac{T'(t)}{a^2 t} = \frac{X''}{X} = -\lambda.$$

Получим обыкновенное дифференциальное уравнение (ОДУ) на отыскание собственных функций и собственных значений

$$X''(x) + \lambda X(x) = 0,$$

$$X'(0) = 0;$$

$$X'(l) = 0.$$

Получим решение в общем виде:

$$X(x) = C_1 \cos \sqrt{\lambda}x + C_2 \sin \sqrt{\lambda}x.$$

Откуда следует, что  $0 = C_2$ , далее

$$\frac{\partial u}{\partial x} = -C_1 \sqrt{\lambda} \sin \sqrt{\lambda}x + C_2 \sqrt{\lambda} \cos \sqrt{\lambda}x.$$

В результате, получаем

$$\sqrt{\lambda}l = \pi n, x_n = \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2; C_1 \neq 0.$$

Отсюда находим

$$X(x) = \cos \frac{\pi n}{l} x.$$

Для любого значения  $i$  решение искомой задачи (17), удовлетворяющей граничным условиям (18), найдем в форме разложения в тригонометрический ряд Фурье по системе ортогональных функций на интервале  $0 < x < l$

$$Z_n(x) = \cos \frac{n\pi x}{l}, n = 0, 1, 2, \dots \quad (19)$$

Данное разложение запишем в виде

$$u_i^{(k)}(x) = \frac{a_{i0}^{(k)}}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_{in}^{(k)} \cos \frac{n\pi x}{l}. \quad (20)$$

Требуется указать способ нахождения коэффициентов  $a_{in}^{(k)}$ . Для того, чтобы указать верный способ, возьмем функцию  $F_i^{(k)}(x)$  входящую в соотношение (17), и разложим ее в тригонометрический ряд Фурье по собственным функциям краевой задачи

$$F_i^{(k)}(x) = \frac{\varphi_{i0}^{(k)}}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_{in}^{(k)} \cos \frac{n\pi x}{l} \quad (21)$$

с коэффициентами, найденными по формуле Эйлера-Фурье [14],

$$\varphi_{in}^{(k)} = \frac{2}{l} \int_0^l F_i^{(k)}(x) \cos \frac{n\pi x}{l} dx, n = 0, 1, 2, \dots$$

Подставляя выражения (20) и (21) в соотношение (17), получим

$$D_i \left( \frac{\pi n}{l} \right)^2 a_{in}^{(k)} + \tau^{-1} a_{in}^{(k)} = \frac{1}{\tau} a_{in}^{(k-1)} + \varphi_{in}^{(k)},$$

делим и находим упомянутые коэффициенты Фурье

$$a_{in}^{(k)} = \frac{a_{in}^{(k-1)}}{\tau D_i \frac{\pi^2 n^2}{l^2} + 1} + \frac{\tau \varphi_{in}^{(k)}}{\tau D_i \frac{\pi^2 n^2}{l^2} + 1}. \quad (22)$$

В результате, получено приближенное решение задачи (13)–(15) на временных слоях  $t = t_k = k\tau, k = 1, 2, \dots$ , в виде разложения функций  $u_i^{(k)}(x) \cong u_i(x, t_k)$  в тригонометрические ряды Фурье (20) с искомыми коэффициентами  $a_{in}^{(k)}$ .

Реализация полученного алгоритма (20)–(22) обусловлена нахождением коэффициентов Фурье функций  $F_i^{(k)}(x)$ , пересчитываемых на каждом шаге по  $k$ .

1.3.2 Использование возможностей ППП MatLab для решения краевой задачи системы одномерных квазилинейных уравнений.

Требуется разработать прикладную программу на языке программирования, реализующую алгоритм (20)–(22) для двухкомпонентной среды ( $i=1, 2$ ).

Результаты вычислений по алгоритму (20)–(22) (см. Приложение А) представлены для следующих характеристик:  $D_1 = 4,4 \cdot 10^{-3}; D_2 = 2,2 \cdot 10^{-3}; l = 1; A = 2,1; B = 5,2$ . В качестве начальных распределений были определены пространственно однородные решения  $U_1 = 2$  и  $U_2 = 2,3$ . При вычислениях удерживалось  $N=21$  членов ряда. Для временного шага  $\tau = 0,1$  выход на стационарное решение в виде диссипативных структур наблюдался при  $k > 120$ . Пример таких диссипативных структур приведен на рисунке 1.

Проведем тестирование полученного алгоритма с варьированием параметров. Увеличивая положительные константы  $A$  и  $B$ , амплитуда волн уменьшается и колебания, изображенные на рисунке 2, становятся более симметричными относительно друг друга. С увеличением концентрации диффундирующего вещества, амплитуда колебаний, изображенных на рисунке 3, увеличива-

ется и виден сильный разброс волн. Далее увеличим коэффициент диффузии  $D_1$  и  $D_2$ . На рисунке 4 мы видим, что колебания становятся повторяющимися и приблизительно с одной амплитудой.

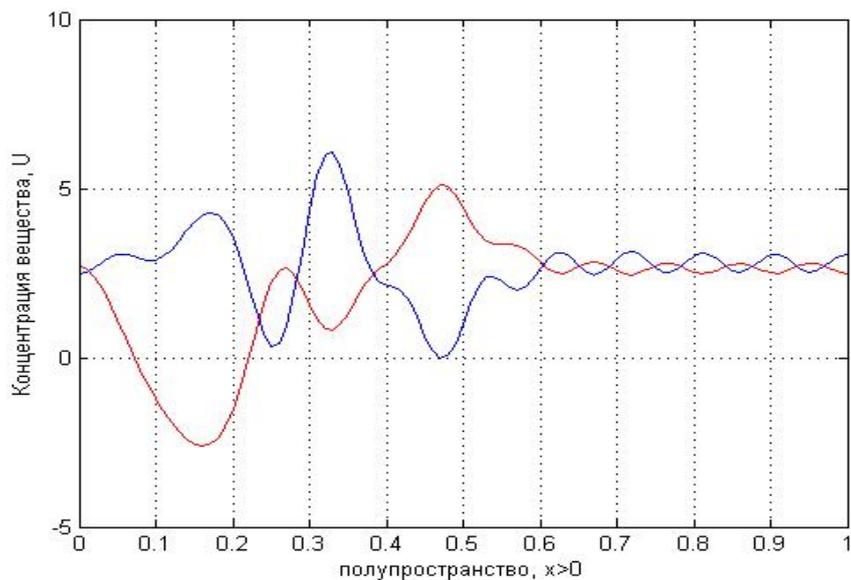


Рисунок 1 – Диссипативные структуры

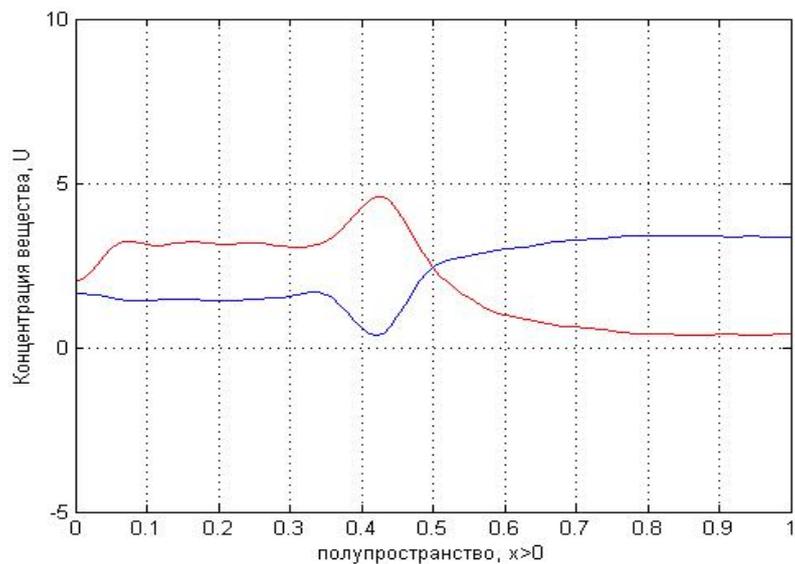


Рисунок 2 – Увеличение положительных констант  $A$  и  $B$

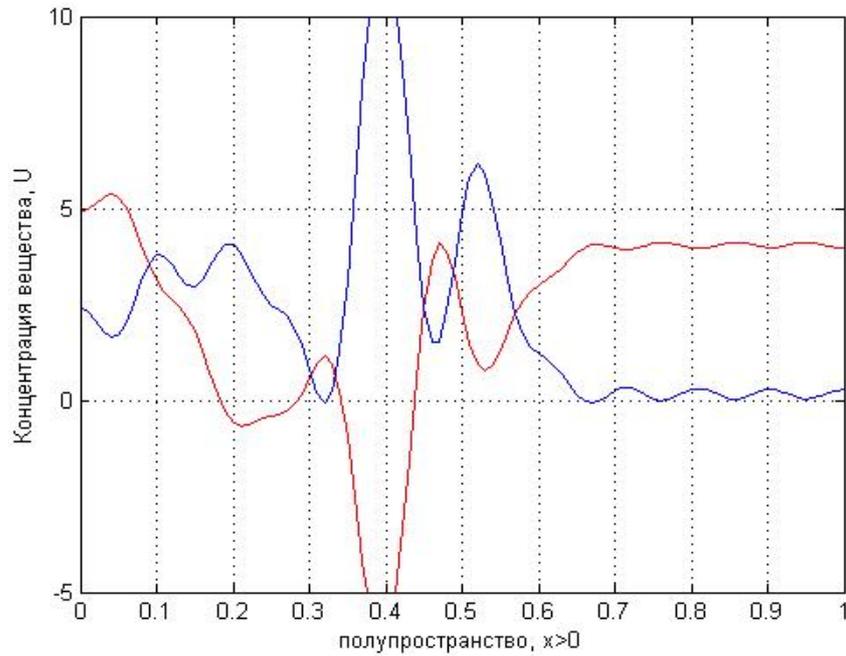


Рисунок 3 – Увеличение концентрации диффундирующего вещества

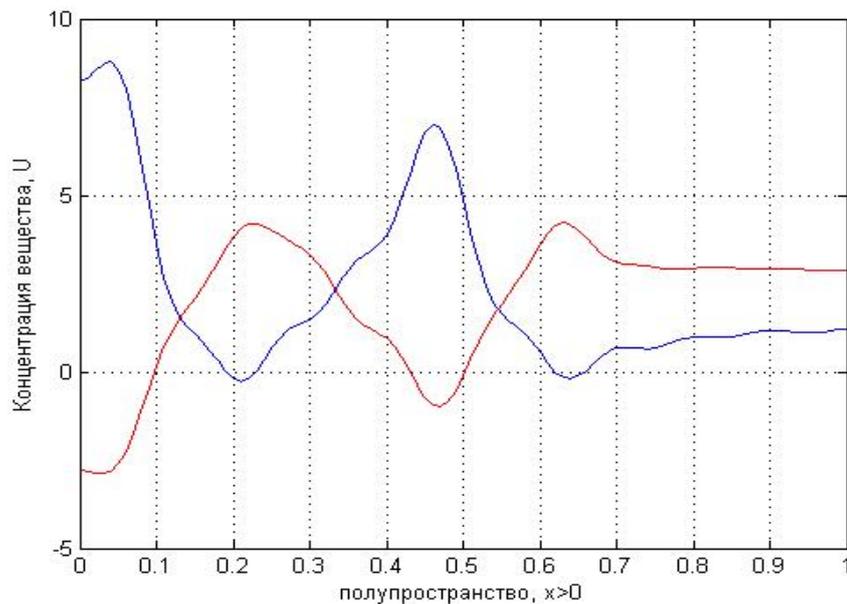


Рисунок 4 – Увеличение коэффициента диффузии  $D_1$  и  $D_2$

Отличительная черта данной модели (13)–(15) заключается в вероятности возникновения периодических колебаний концентраций веществ. Данные автоколебания наблюдаются экспериментально в химических системах. Одну из первых автоколебательных химических реакций называют реакцией Белоусова-

Жаботинского, которые наблюдали и объясняли периодическое изменение окраски раствора протеканием в нем химических реакций [14].

Исследования существующих математических моделей диффузионно-кинетических процессов и явлений демонстрируют возможность появления упорядоченных, структурно-организационных состояний, а также состояния, изменяющегося с конкретной особенностью и периодичностью, что обусловлено нелинейностью в многокомпонентных системах реагирующих частиц.

## 2 ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И СРЕДСТВА ПРОГРАММНОЙ РЕАЛИЗАЦИИ

Моделирование является важной отраслью научной деятельности, задача которой – выявить основные черты поведения рассматриваемой системы и процесса. Аналитические методы позволяют исследовать достаточно узкий класс задач. С помощью математической модели возможно описать объект моделирования в виде системы или одного уравнения. В случае адекватности модели, можно провести вычислительный эксперимент, который допускает активное использование численных методов [15].

Теория численных методов основывается, с одной стороны, на достижениях классической математики, а с другой – на современных технологиях программирования и возможности вычислительной техники. Численные методы позволяют решать задачи, следующих разделов:

- численные методы оптимизации (одномерная минимизация, многомерная оптимизация, градиентные методы, методы условной оптимизации и другие);
- численные методы решения задач Коши (начальные и краевые) для ОДУ;
- численные методы решения уравнений с частными производными (УЧП);
- численные методы интегральных уравнений;
- численное дифференцирование и интегрирование (метод неопределенных коэффициентов);
- методы аппроксимации функций;
- численные методы решения систем нелинейных алгебраических уравнений (метод Ньютона, модифицированный метод Ньютона и метод простых итераций);
- численные методы задач линейной алгебры для решения системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ);

- численные методы решения алгебраических нелинейных уравнений.

Численный анализ любой прикладной задачи приводит к появлению погрешностей следующих основных типов:

- погрешность задачи связана с приближенным характером исследуемой модели и её математическим описанием; для вычислителя данную погрешность стоит считать неустранимой или безусловной;

- погрешность метода связана с выбором численного метода для решения исходной задачи; для вычислителя данную погрешность стоит считать устранимой или условной;

- погрешность округлений (действий) обусловлена необходимостью выполнения математических операций над приближенными числами.

В совокупности все три перечисленных типа образуют полную погрешность результата решения исходной задачи.

## **2.1 Пакет прикладных программ *MatLab***

*MatLab* (сокращение от англ. «*Matrix Laboratory*») – одна из немногих, детально рассмотренных и надежных систем автоматизации математических вычислений, созданная на обширном представлении и применении матричных операций [16]. *MatLab* является мощным и многофункциональным средством обработки многомерных данных. При помощи ППП *MatLab* можно выполнить следующие операции: матричный анализ данных, обработку сигналов и изображений, нейронные сети и другие.

Пакет прикладных программ *MatLab* – это высокоуровневый язык программирования, содержащий реализованные на матрицах структуры данных, большое количество различных функций, объектно-ориентированные возможности и интерфейсы к программам, написанным на других языках программирования. *MatLab* дает возможность применения готовых различных моделей и управлять набором данных и оперативно переключать искомые модели.

*MatLab* можно использовать при вычислении матриц и задач линейной алгебры; дифференциальных уравнений. А также в математической статистике

и анализе. Кроме того, язык программирования *MatLab* используется для создания высокоуровневых алгоритмов с применением идей объектно – ориентированного программирования.

Используя инженерный пакет можно обширно применять возможности визуализации данных.

## **2.2 Мультифизический пакет COMSOL**

Для решения задачи экологического прогнозирования использовался мультифизический пакет *COMSOL*, предназначенный для моделирования физических процессов.

*COMSOL Multiphysics* позволяет производить вычисления методом конечных элементов различных процессов и явлений, а модели и функции значительно расширяют их возможности. С помощью различных модулей можно моделировать различные химические, механические, гидродинамические и электрические явления. При решении тяжелых задач допустимо комбинировать несколько модулей одновременно.

*COMSOL Desktop* – это совокупность средств программирования для моделирования физических процессов и создания продуктов, независимых от области применения. В дереве моделей *Model Builder* доступны обзор моделей, большое количество функций – геометрии, построение сеток, настройка физических процессов, граничных условий и визуализации. *COMSOL Multiphysics* дает возможность добавлять уравнения, свойства материалов, вводить граничные условия и системы уравнений в частных производных.

При программировании в *COMSOL Multiphysics* всегда отображается постановка задачи, т.е. пользователю доступны как уравнения, описывающие процесс, так и граничные условия. *COMSOL Multiphysics* является мощным комплексом для решения задач методом конечных разностей [17].

### **2.2.1 Модуль Heat Transfer.**

*Heat Transfer Module* («Теплопередача») позволяет изучать влияние нагрева и охлаждения на различные детали, явления или процессы. Благодаря инструментам, которые включены в раздел данного модуля, можно исследовать

механизмы теплопередачи – теплопроводность, конвекцию и многое другое. В частности, данный модуль является основным комплексом для решения задач, когда выделение, поглощение и передачи теплоты является главным процессом.

Модуль *Heat Transfer* включает в себя базу данных теплофизических и термодинамических свойств жидкостей и газов. База данных содержит информацию о теплопроводности, теплоемкости и плотности различных веществ.

Рабочий процесс при программировании в *COMSOL Multiphysics* состоит из следующих этапов:

создание геометрии материи или системы;

- подбор веществ или материалов, зависящих от температуры физических свойств;

- описание процесса теплопередачи в исследуемой системе;

- учет различных физических явлений связанных с переносом теплоты, в рамках одной модели;

- задание краевых условий на границах исследуемой области;

- построение расчетной сетки;

- построение решения;

- анализ и визуализация полученных результатов.

Модуль *Heat Transfer* позволяет анализировать перенос тепла за счет теплопроводности в жидкостях и газах, твердых телах. Кроме того, модуль предоставляет средства для моделирования процесса переноса тепла теплопроводностью, т.е. позволяет моделировать тепловые процессы с более высокой точностью. Также модуль дает возможность моделировать процесс переноса тепла во взаимодействующих с излучением средах с учетом выделения, рассеивания и поглощения теплового излучения.

Если в исследуемой системе существуют движущиеся массы жидкости или газа, то перенос тепла рассматривается еще одним процессом – конвекцией. В данном разделе доступно моделирование вынужденной и свободной конвекции.

### 2.3 Метод расщепления

Аналитические решения уравнения турбулентной диффузии в настоящее время найти не удастся, поэтому моделирование данной задачи можно провести только численно. Для нахождения численного решения уравнения (2) будем использовать метод локально-одномерного *расщепления* [18]. Основная идея метода заключается в разбиении уравнения (2) на три одномерных уравнения, решаемых на каждой итерации последовательно:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} D_x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{3} Q = 0; \quad (23)$$

и

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} D_y \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{1}{3} Q; \quad (24)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} D_z \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{1}{3} Q.$$

Соотношение (23) характеризует процесс переноса газообразных и твердых частиц примеси с ее сохранением под действием ветра и силы тяжести. Соотношение (24) характеризует процесс турбулентной диффузии примеси в воздушной среде и добавление примеси источником  $f$ .

Расщепление уравнения (23) осуществляется следующим образом:

для оси  $x$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_1}{\partial t} + v_x \frac{\partial u_1}{\partial x} + \frac{u_1}{2} \frac{\partial v_x}{\partial x} &= 0, \\ x^2 + y^2 + z^2 &\rightarrow 0, u_1(x, y, z, t) \rightarrow 0, \end{aligned} \quad (25)$$

и для оси  $z$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_2}{\partial t} - v_z \frac{\partial u_2}{\partial z} - \frac{u_2}{2} \frac{\partial v_z}{\partial z} &= 0, \\ x^2 + y^2 + z^2 &\rightarrow 0, u_2(x, y, z, t) \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (26)$$

Решение задач (25) и (26) происходит путем аппроксимации численного дифференцирования. Полученные системы можно реализовать методом *прогонки* [19].

Задачу (24) можно разбить на три подзадачи:

для оси  $x$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_1}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} D_x \frac{\partial u_1}{\partial x}, \\ x^2 + y^2 + z^2 &\rightarrow 0, u_1(x, y, z, t) \rightarrow 0, \end{aligned} \quad (27)$$

для оси  $y$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_2}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial y} D_y \frac{\partial u_2}{\partial y}, \\ x^2 + y^2 + z^2 &\rightarrow 0, u_2(x, y, z, t) \rightarrow 0, \end{aligned} \quad (28)$$

и для оси  $z$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_3}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial z} D_z \frac{\partial u_3}{\partial z} + f, \\ x^2 + y^2 + z^2 &\rightarrow 0, u_3(x, y, z, t) \rightarrow 0, D_z \frac{\partial u_3}{\partial z} \Big|_{z=0} = 0. \end{aligned} \quad (29)$$

Решение задач (27) - (29) происходит путем аппроксимации численного дифференцирования. Полученные системы можно реализовать методом *прогонки*.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} D_x \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} D_y \frac{\partial u}{\partial y} + v \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} D_z \frac{\partial u}{\partial z} + \alpha u = f(t, x, y, z) \quad (30)$$

Обозначим  $A_1, A_2, A_3$ :

$$\begin{aligned} A_1 u &= v \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} D_x \frac{\partial u}{\partial x}, \\ A_2 u &= -\frac{\partial}{\partial y} D_y \frac{\partial u}{\partial y}, \\ A_3 u &= v \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} D_z \frac{\partial u}{\partial z} + \alpha u. \end{aligned}$$

Уравнение (30) запишется в следующей форме:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + (A_1 + A_2 + A_3)u = f(t, x, y, z). \quad (31)$$

Через  $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$  обозначим операторы, отвечающие конечно-разностным аналогам операторов  $A_1, A_2, A_3$ . Конечно-разностное уравнение для соотношения (31) примет вид:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + (\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3)u = f(t, x, y, z). \quad (32)$$

Тогда решение уравнения (32) можно получить, используя метод *покомпонентного расщепления* [20]. Потребуется решить следующие конечно-разностные уравнения:

$$\frac{u^{t+\Delta t/6} - u^t}{\Delta t} + \lambda_1 \frac{u^{t+\Delta t/6} + u^t}{2} = 0, \quad (33)$$

$$\frac{u^{t+\Delta t/6} - u^{t+\Delta t/12}}{\Delta t} + \lambda_1 \frac{u^{t+\Delta t/6} + u^{t+\Delta t/12}}{2} = 0, \quad (34)$$

$$\frac{u^{t+\Delta t/6} - u^{t+\Delta t/18}}{\Delta t} + \lambda_1 \frac{u^{t+\Delta t/6} + u^{t+\Delta t/18}}{2} = \frac{f\left(t - \Delta t \frac{1}{2}, x, y, z\right)}{2}, \quad (35)$$

$$\frac{u^{t+\Delta t/6} - u^{t+\Delta t/24}}{\Delta t} + \lambda_1 \frac{u^{t+\Delta t/6} + u^{t+\Delta t/24}}{2} = \frac{f\left(t + \Delta t \frac{1}{2}, x, y, z\right)}{2}, \quad (36)$$

$$\frac{u^{t+\Delta t/6} - u^{t+\Delta t/30}}{\Delta t} + \lambda_1 \frac{u^{t+\Delta t/6} + u^{t+\Delta t/30}}{2} = 0, \quad (37)$$

$$\frac{u^{t+\Delta t} - u^{t+\Delta t/30}}{\Delta t} + \lambda_1 \frac{u^{t+\Delta t} + u^{t+\Delta t/30}}{2} = 0, \quad (38)$$

где  $\Delta t$  – шаг дискретизации по времени.

Система уравнений (33) – (38) имеет второй порядок аппроксимации по  $\Delta t$ .

Применяя численные методы, удастся найти точные решения уравнения (2) для любых исходных параметров. Метод локально-одномерного *расщепления* позволяет определить более точные результаты и хорошо комбинирует с экспериментальными данными. Главным недостатком метода является трудоемкий процесс определения коэффициентов турбулентной диффузии

### 3 ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПРОДУКТОВ СГОРАНИЯ ТЭПЛОЭЛЕКТРОЦЕНТРАЛИ В АТМОСФЕРЕ

Моделирование данного процесса протекает в прямоугольной области. При постановке задачи рассматриваются основные факторы, такие как скорость ветра и процесса выброса вредных веществ в воздушную среду. Выброс частиц на начальном этапе происходит под действием итерационных сил [21]. Далее выброс осуществляется набегаящим потоком. Смесь продуктов сгорания в дальнейшем перемещается вертикально вверх с постоянно убывающей скоростью газового потока. Кроме итерационных сил, определяющих движение смеси продуктов сгорания, также учитывается характер диффузионного переноса. Поток вредных веществ постепенно расширяется. Температура газового потока может варьироваться от 300 до 360 К. Поток состоит из воздуха с газообразными и твердыми частицами вредных веществ.

Выбор математической модели осуществлялся учитывая следующие факторы: твердые частицы оседают на не большом расстоянии от источника выбросов и представляют большую опасность для атмосферы и населения в целом, а более мелкие частицы рассеиваются на большой территории и оседают только в результате осадков.

#### **3.1 Общая характеристика предприятия**

Благовещенская (Амурская) ТЭЦ входит в состав ОАО «Дальневосточная генерирующая компания», филиал «Амурская генерация» [22]. Теплоэлектроцентраль расположена в г. Благовещенске по адресу: ул. Загородная, 177. Основным видом деятельности Благовещенской теплоэлектроцентрали является выработка тепловой и электрической энергии.

Установленная мощность станции составляет:

- электрическая 280 МВт,
- тепловая 817 Г кал/час.

Благовещенская теплоэлектроцентраль основана в 1976 году. Основное вид сырья – бурый уголь. Амурская теплоэлектростанция снабжает тепловой

энергией промышленные предприятия и жителей города, а также является базовым предприятием для амурских учебных заведений, выпускающих энергетиков. Теплоэлектроцентр оборудован четырьмя энергетическими паровыми котлами БКЗ-420-140 номинальной производительностью 420 тонн пара в час. Выработка электроэнергии производится в трех турбоагрегатах марок: ПТ60-130/13 - 1 шт. и Т110/120-130-2 шт.

В течении года нагрузка неравномерная: максимальная нагрузка приходится на отопительный сезон (октябрь — апрель), минимальная на май - сентябрь. Объем вырабатываемой электрической энергии определяется диспетчерским графиком (Амурское РДУ), тепловой энергии - договорными нагрузками.

Принцип работы Благовещенской ТЭЦ приведен на рисунке 5.

Существует вероятность подачи бурого угля сквозь узел пересыпки 3.

Следует отметить, что основная часть энергетического оборудования Благовещенской теплоэлектроцентрали отличается большой сложностью и высокой единичной мощностью. Поэтому при организации технологического процесса приходится обрабатывать большие объемы информации для поиска оптимальных решений, направленных на обеспечение более высокого организационного и эксплуатационного уровня производства энергии.

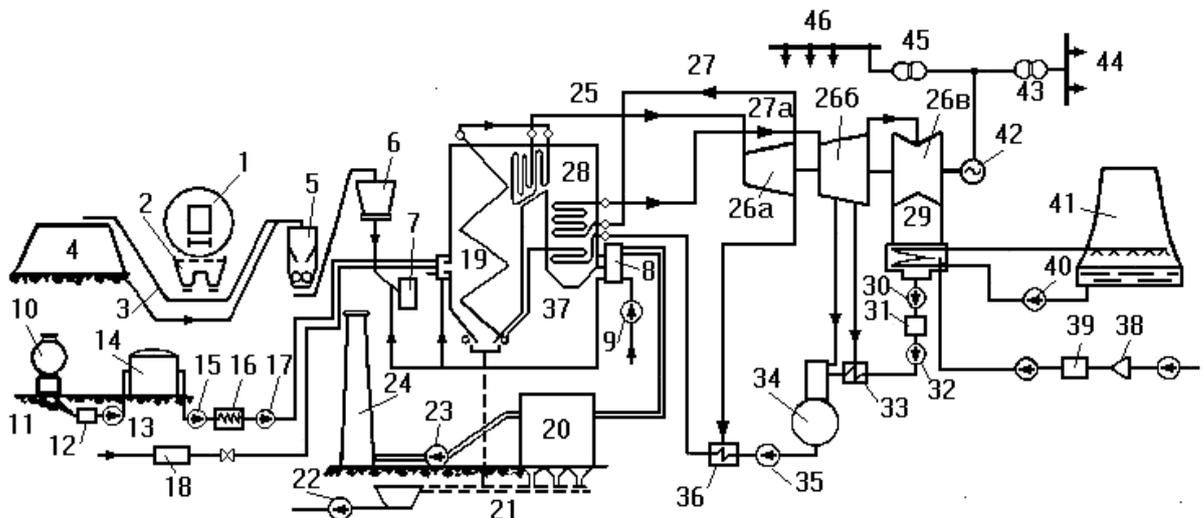


Рисунок 5 – Технологическая схема ТЭЦ

Электрическая мощность станции 280 МВт, теплофикационная – 817 Гкал/час.

Тип котла БКЗ – 420 – 140 (барнаульский котельный завод). Количество 4 штуки. Коэффициент полезного действия (КПД) котлов колеблется в диапазоне от 90,1 до 91,2 %.

Горячие водоснабжение, которое осуществляется по схеме с закрытым водозабором с использованием воды из городского хозяйственно-питьевого водопровода. Зола из котлов после сжигания топлива частично удаляется виде шлака, а частично уносится дымовыми газами. Очистку дымовых газов проводят в электрофильтре и мокрых скрубберах [23].

Основным дополнением теории атмосферной диффузии является нормирование вредных выбросов. Основная задача состоит в обеспечении чистоты в приземном слое атмосферы, когда в воздушной среде достигаются максимальные концентрации активной примеси.

В настоящее время распространение продуктов сгорания от промышленных предприятий происходит с начальной скоростью и перегревом по отношению к окружающей среде [24]. Кроме того, можно установить, что такие выбросы вредных веществ осуществляются на некоторой эффективной высоте. В таких случаях существует вероятность выявить неблагоприятные метеорологические условия, включая опасную скорость ветра, при которой концентрация достигает наибольшего показателя.

### **3.2 Численное решение нестационарной задачи рассеивания активной примеси**

Турбулентная диффузия рассеивания активной примеси в приземном слое атмосферы описывается следующим соотношением:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} D_x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} D_y \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} D_z \frac{\partial u}{\partial z} + Q,$$

где  $Q$  – функция, описывающая действие источника;

$$\text{с граничными условиями } D_z \frac{\partial u}{\partial z} \Big|_{z=0} = 0, u \Big|_{x^2+y^2+z^2 \rightarrow \infty} = 0. \quad (39)$$

Для численного моделирования используется неявная конечно-разностная схема. Фактически исходное уравнение сводится к трем одномерным уравнениям, решаемым на каждой итерации последовательно

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} D_x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{3} Q = 0;$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} D_y \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{1}{3} Q;$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} D_z \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{1}{3} Q.$$

Каждое из этих уравнений может быть дискретизовано с помощью неявных конечно-разностных схем в сочетании с противоточными производными для конвективного члена. Получаемая схема рассчитывается с помощью метода *прогонки*.

Запишем дискретизацию первого из уравнений

$$\begin{aligned} & \frac{u_{ijk}^{s+1} - u_{ijk}^s}{\tau} + u_{ijk}^+ \frac{u_{ijk}^{s+1} - u_{i-1,jk}^{s+1}}{h} + u_{ijk}^- \frac{u_{i+1,jk}^{s+1} - u_{i,jk}^{s+1}}{h} = \\ & \frac{k_{i+1,jk} + k_{ijk}}{2} \frac{u_{i+1,jk}^{s+1} - u_{ijk}^{s+1}}{h} - \frac{k_{ijk} + k_{i-1,jk}}{2} \frac{u_{ijk}^{s+1} - u_{i-1,jk}^{s+1}}{h} + \frac{Q_{ijk}}{3}. \end{aligned}$$

Здесь  $i, j, k$  – индексы узла сетки;

$s$  – индекс итерации по времени;

$\tau$  – шаг по времени;

$h$  – шаг сетки по координате.

$$v_{ijk}^+ = \begin{cases} v_{ijk}, & \text{если } v_{ijk} > 0, \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}$$

$$v_{ijk}^- = \begin{cases} v_{ijk}, & \text{если } v_{ijk} < 0, \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Разностное выражение может быть переписано в форме

$$u_{ijk}^{s+1} = H_{i+1} u_{i+1,jk}^{s+1} + L_{i+1}.$$

Для коэффициентов  $H$  и  $L$  можно вывести рекуррентные формулы

$$\begin{aligned}
H_{i+1} &= \frac{V_2}{V_1 - H_i V_3}; \\
L_{i+1} &= \frac{L_i V_3 + u_{ijk}^s + \frac{\tau}{3} Q_{ijk}}{V_1 - H_i V_3}; \\
V_1 &= 1 + v_{ijk}^+ \frac{\tau}{h} - v_{ijk}^- \frac{\tau}{h} + \tau \frac{u_{i+1,jk} + u_{ijk}}{2h^2} + \tau \frac{u_{ijk} + u_{i-1,jk}}{2h^2}; \\
V_2 &= -v_{ijk}^- \frac{\tau}{h} + \tau \frac{u_{i+1,jk} + u_{ijk}}{2h^2}; \\
V_3 &= v_{ijk}^+ \frac{\tau}{h} + \tau \frac{u_{ijk} + u_{i-1,jk}}{2h^2}.
\end{aligned}$$

Каждое полученное соотношение аппроксимируются конечно-разностными выражениями [31].

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u_1}{\partial t} + v_x \frac{\partial u_1}{\partial x} + v_z \frac{\partial u_1}{\partial z} &= 0, \\
x^2 + y^2 + z^2 \rightarrow 0, u(x, y, z, t) \rightarrow 0, u_1(x, y, z, t) &= u(x, y, z, t);
\end{aligned} \tag{40}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u_2}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} D_x \frac{\partial u_2}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} D_y \frac{\partial u_2}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} D_z \frac{\partial u_2}{\partial z}, \\
x^2 + y^2 + z^2 \rightarrow 0, u_2(x, y, z, t) &\rightarrow 0, \\
u_2(x, y, z, t) &= u_1(x, y, z, t + \Delta t), \\
u_2(x, y, z_0, t) &= 0;
\end{aligned} \tag{41}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u_3}{\partial t} + \alpha u_3 &= f, \\
u_3(x, y, z, t) &= u_2(x, y, z, t + \Delta t).
\end{aligned} \tag{42}$$

$$xs_x = x_i S_x, ys_y = y_i S_y, zs_z = z_i S_z. \tag{43}$$

Тогда

$$xs_x = x_i S_x, ys_y = y_i S_y, zs_z = z_i S_z. \tag{44}$$

Положим, что  $v_0$  сходится с  $(x_i, y_j, z_k)$ , а  $v_{\Delta v}$  с  $(xs_x, ys_y, zs_z)$ . Из (40) для  $\Delta t$

получаем

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} + |v| \cos \alpha \frac{\partial u_1}{\partial x} + |v| \cos \left( \frac{\pi}{2} \right) \frac{\partial u_1}{\partial y} + |v| \cos \left( \frac{\pi}{2} - \alpha \right) \frac{\partial u_1}{\partial z} = 0, \tag{45}$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} + |v| \left( \cos \alpha \frac{\partial u_1}{\partial x} + \cos \left( \frac{\pi}{2} \right) \frac{\partial u_1}{\partial y} + \cos \left( \frac{\pi}{2} - \alpha \right) \frac{\partial u_1}{\partial z} \right) = 0, \quad (46)$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} + |v| \frac{\partial u_1}{\partial v} = 0. \quad (47)$$

$$\text{Так как } v_x = |v| \cos \alpha; v_y = |v| \cos \left( \frac{\pi}{2} \right); v_z = |v| \cos \left( \frac{\pi}{2} - \alpha \right).$$

Для соотношения (47) запишем явную разностную схему, выполнив некоторые преобразования

$$\Delta v = \sqrt{S_x^2 + S_y^2 + S_z^2} = \sqrt{S_x^2 + S_z^2}, \quad (48)$$

$$\frac{u_1(t + \Delta t, v_{\Delta v}) - u_1(t, v_{\Delta v})}{\Delta t} + |v| \frac{u_1(t, v_{\Delta v}) - u_1(t, v_0)}{\Delta v}, \quad (49)$$

$$(u_1(t + \Delta t, v_{\Delta v}) - u_1(t, v_{\Delta v})) + \frac{|v| \Delta t}{\Delta v} (u_1(t, v_{\Delta v}) - u_1(t, v_0)) = 0, \quad (50)$$

$$\frac{|v| \Delta t}{\Delta v} = \Delta t \sqrt{\frac{v_x^2 + v_z^2}{S_x^2 + S_z^2}} = \sqrt{\frac{\Delta t^2 (v_x^2 + v_z^2)}{(S_x^2 + S_z^2)}} = \sqrt{\frac{S_x^2 + S_z^2}{S_x^2 + S_z^2}} = 1, \quad (51)$$

$$u_1(t + \Delta t, v_{\Delta v}) - u_1(t, v_{\Delta v}) + u_1(t, v_{\Delta v}) - u_1(t, v_0) = 0, \quad (52)$$

$$u_1(t + \Delta t, v_{\Delta v}) = u_1(t, v_0). \quad (53)$$

В результате

$$u_1(t + \Delta t, x s_x, y s_y, z s_z) = u_1(t, x_i, y_j, z_k). \quad (54)$$

Моделирование уравнения (40) ищем в узловых точках сетки, тогда параметры  $(x s_x, y s_y, z s_z)$  удовлетворяют выражениям:

$$x s_x = x_i \Delta i \Delta x, y s_y = y_j \Delta j \Delta y, z s_z = z_k \Delta k \Delta z. \quad (55)$$

где  $\Delta i, \Delta j, \Delta k$  – целые числа.

$$\text{Отсюда } \Delta i = \left[ \frac{x s_x}{\Delta x} \right]; \Delta j = 0; \Delta k = \left[ \frac{z s_z}{\Delta z} \right].$$

Вычислить перенос активной примеси по оси  $x$  при  $v_x \Delta t < \Delta x, \Delta i = 0$  не удастся. Также и для оси  $z$ , что не правдоподобно. Поэтому можно варьировать значения концентрации одновременно в 4 точках сетки, используя следующие выражения:

$$u_1(t + \Delta t, x_{i+\Delta i}, y_j, z_{k+\Delta k}) = u_1(t, x_i, y_j, z_k)(1 - r_x)(1 - r_z), \quad (56)$$

$$u_1(t + \Delta t, x_{i+\Delta i}, y_j, z_{k+\Delta k+1}) = u_1(t, x_i, y_j, z_k)(1 - r_x)r_z, \quad (57)$$

$$u_1(t + \Delta t, x_{i+\Delta i+1}, y_j, z_{k+\Delta k}) = u_1(t, x_i, y_j, z_k)r_x(1 - r_z), \quad (58)$$

$$u_1(t + \Delta t, x_{i+\Delta i+1}, y_j, z_{k+\Delta k+1}) = u_1(t, x_i, y_j, z_k)r_xr_z, \quad (59)$$

Где

$$r_x = \frac{xS_x - x_i}{\Delta x} - \Delta i, r_z = \frac{zS_z - z_k}{\Delta z} - \Delta k. \quad (60)$$

Задачу (41) можно решить методом *покомпонентного расщепления*

для оси  $x$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_4}{\partial t} - D_x \frac{\partial^2 u_4}{\partial x^2} &= 0, \\ u_4(x, y, z_0, t) &= 0, \\ x^2 + y^2 + z^2 \rightarrow 0, u_4(x, y, z, t) &\rightarrow 0, \\ u_4(x, y, z, t) &= u_1(x, y, z, t + \Delta t); \end{aligned} \quad (61)$$

для оси  $y$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_5}{\partial t} - D_y \frac{\partial^2 u_5}{\partial y^2} &= 0, \\ u_5(x, y, z_0, t) &= 0, \\ x^2 + y^2 + z^2 \rightarrow 0, u_5(x, y, z, t) &\rightarrow 0, \\ u_5(x, y, z, t) &= u_4(x, y, z, t + \Delta t); \end{aligned} \quad (62)$$

для оси  $z$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_6}{\partial t} - D_z \frac{\partial^2 u_6}{\partial z^2} &= 0, \\ u_6(x, y, z_0, t) &= 0, \\ x^2 + y^2 + z^2 \rightarrow 0, u_6(x, y, z, t) &\rightarrow 0, \\ u_6(x, y, z, t) &= u_5(x, y, z, t + \Delta t); \end{aligned} \quad (63)$$

Выполним аппроксимацию задачи (61) – (63). Для этого введем явную разностную схему для выражения (61)

$$\frac{u_4(t + \Delta t, x_i, y_j, z_k) - u_4(t, x_i, y_j, z_k)}{\Delta t} - D_x \frac{u_4(t, x_{i-1}, y_j, z_k) - 2u_4(t, x_i, y_j, z_k) + u_4(t, x_{i+1}, y_j, z_k)}{(\Delta x)^2} = 0. \quad (64)$$

Можно записать не явную разностную схему для соотношения (64)

$$\frac{u_4(t + \Delta t, x_i, y_j, z_k) - u_4(t, x_i, y_j, z_k)}{\Delta t} - D_x \frac{u_4(t + \Delta t, x_{i-1}, y_j, z_k) - 2u_4(t + \Delta t, x_i, y_j, z_k) + u_4(t + \Delta t, x_{i+1}, y_j, z_k)}{(\Delta x)^2} = 0. \quad (65)$$

Вычисляя полусумму выражений (64) и (65), получаем схему *Кранка-Николсона* [24]:

$$\frac{u_4(t + \Delta t, x_i, y_j, z_k) - u_4(t, x_i, y_j, z_k)}{\Delta t} - \frac{D_x}{2(\Delta x)^2} (u_4(t, x_{i-1}, y_j, z_k) - 2u_4(t, x_i, y_j, z_k) + u_4(t, x_{i+1}, y_j, z_k)) - \frac{D_x}{2(\Delta x)^2} (u_4(t + \Delta t, x_{i-1}, y_j, z_k) - 2u_4(t + \Delta t, x_i, y_j, z_k) + u_4(t + \Delta t, x_{i+1}, y_j, z_k)) = 0, \quad (66)$$

$$\begin{aligned} & - \frac{\Delta t D_x}{2(\Delta x)^2} u_4(t + \Delta t, x_{i-1}, y_j, z_k) + \left( \frac{\Delta t D_x}{(\Delta x)^2} + 1 \right) u_4(t + \Delta t, x_i, y_j, z_k) - \\ & - \frac{\Delta t D_x}{2(\Delta x)^2} u_4(t + \Delta t, x_{i+1}, y_j, z_k) = u_4(t, x_i, y_j, z_k) + \\ & + \frac{\Delta t D_x}{2(\Delta x)^2} (u_4(t, x_{i-1}, y_j, z_k) - 2u_4(t, x_i, y_j, z_k) + u_4(t, x_{i+1}, y_j, z_k)). \end{aligned} \quad (67)$$

В результате, получаем трехдиагональную СЛАУ [26]

$$A_i u_6(t + \Delta t, x_i, y_j, z_{k-2}) + C_i u_6(t + \Delta t, x_i, y_j, z_k) + B_i u_6(t + \Delta t, x_i, y_j, z_{k+2}) = r_i. \quad (74)$$

После отыскания  $u_3(t + \Delta t, x_i, y_j, z_k)$  полагаем

$u(t + \Delta t, x_i, y_j, z_k) = u_3(t + \Delta t, x_i, y_j, z_k)$ , т.е. мы замыкаем соотношение (61) – (63), и все готово для следующего расчетного шага – определения  $u(t + 2\Delta t, x_i, y_j, z_k)$ .

Каждое из этих уравнений может быть дискретизовано с помощью неявных разностных схем в сочетании с противоточными производными для кон-

вективного члена [27]. Получаемая схема рассчитывается с помощью метода прогонки.

Численный алгоритм нахождения концентрации активных примесей в атмосфере приведен в Приложение Б.

Результаты разработанной прикладной программы в *COMSOL Multiphysics*, предназначенной для выявления закономерностей распространения газообразных и твердых частиц продуктов сгорания, учитывая особенности трубы, окружающей среды и продуктов сгорания изображены на рисунке 6. При разработке данной программы учитывались следующие характеристики: высота дымовой трубы – 210 м; скорость ветра 1,8 м/с; направление ветра: северо – западный; время действия источника – 120 с; скорость выхода дымовых газов – 13,23 м/с; температура газового потока – 68 градусов цельсия; также учитывались масса и плотность газообразных и твердых частиц, таких как оксид и диоксид азота, оксид углерода и сернистый ангидрид. Трассировка частиц проводилась для данных протокола испытаний Благовещенской ТЭЦ для двух периодов: май и ноябрь 2018г. Параметры и настройки модели приведены на рисунке 7. Температура газового потока представлена на рисунках 8 и 8а. Скорость движения дымовых газов показана на рисунке 9. На рисунке 10 приведена расчетная область. Температурное распределение газового потока в 2D постановке показано на рисунке 11. Трассировка частиц в течении 22 секунд изображена на рисунке 12. На рисунках 13 и 14 показана зависимость концентрации газового потока от времени для данных из протокола испытаний ОАО «Дальневосточная генерирующая компания» за май и ноябрь месяц соответственно.

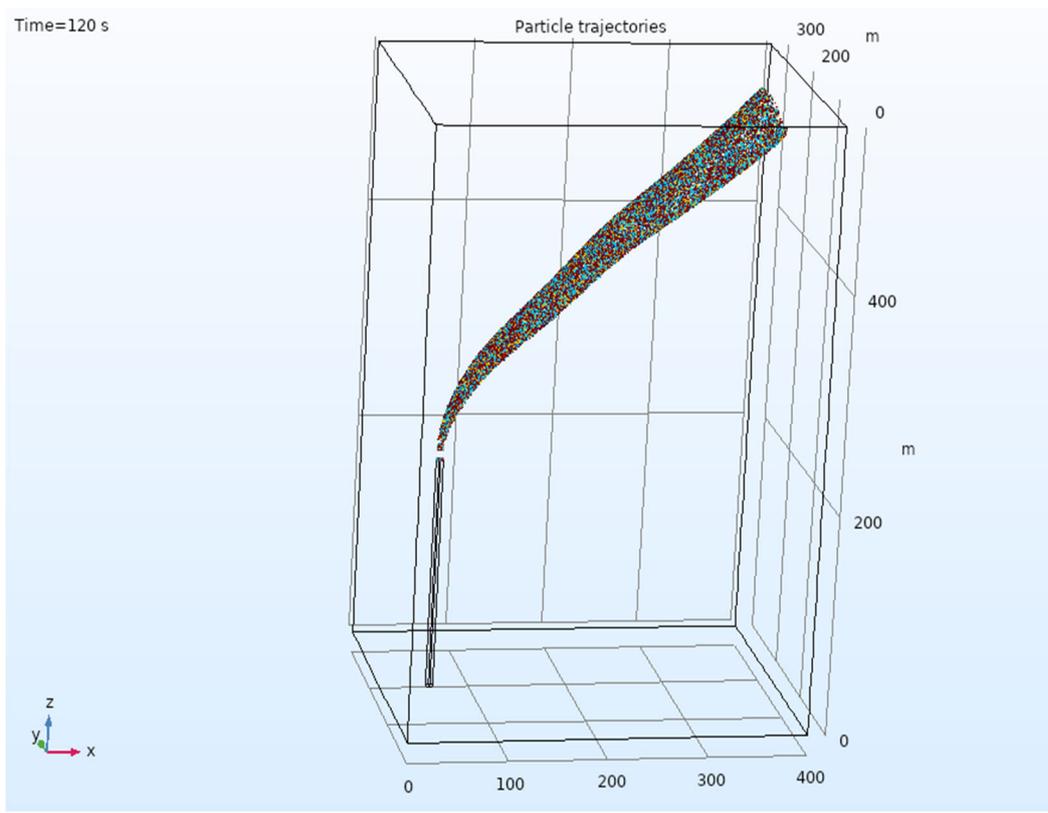


Рисунок 6 – Трассировка газообразных и твердых частиц

Parameters			
Name	Expression	Value	Description
V_wind	1.8[m/s]	1.8 m/s	Скорость ветра
T_dust	68[degC]	341.15 K	Температура газового п...
V_dust	13.23[m/s]	13.23 m/s	Скорость выхода дымов...
n_NO	49.27[mg/m^3]	4.927E-5 kg/m <sup>3</sup>	
n_NO2	303.21[mg/m^3]	3.0321E-4 kg/...	
n_CO	10.67[mg/m^3]	1.067E-5 kg/m <sup>3</sup>	
n_Angr	267[mg/m^3]	2.67E-4 kg/m <sup>3</sup>	
rho_NO	1.34[kg/cm^3]	1.34E6 kg/m <sup>3</sup>	
rho_NO2	1.45[kg/cm^3]	1450 kg/m <sup>3</sup>	
rho_CO	1.15[kg/m^3]	1.15 kg/m <sup>3</sup>	
rho_Angr	2.63[kg/m^3]	2.63 kg/m <sup>3</sup>	
m_CO	15.999[g/mol]/N_A_c...	4.6511E-26 kg	
m_NO	14.0067[g/mol]/N_A_...	4.9826E-26 kg	
m_NO2	14.0067[g/mol]/N_A_...	7.6393E-26 kg	
m_SO2	32.065[g/mol]/N_A_c...	1.0638E-25 kg	
Vol_air_pipe	V_dust*pi*(7.2[m]/2)...	538.66 m <sup>3</sup>	
time_mod	2[min]	120 s	

Рисунок 7 – Числовые параметры

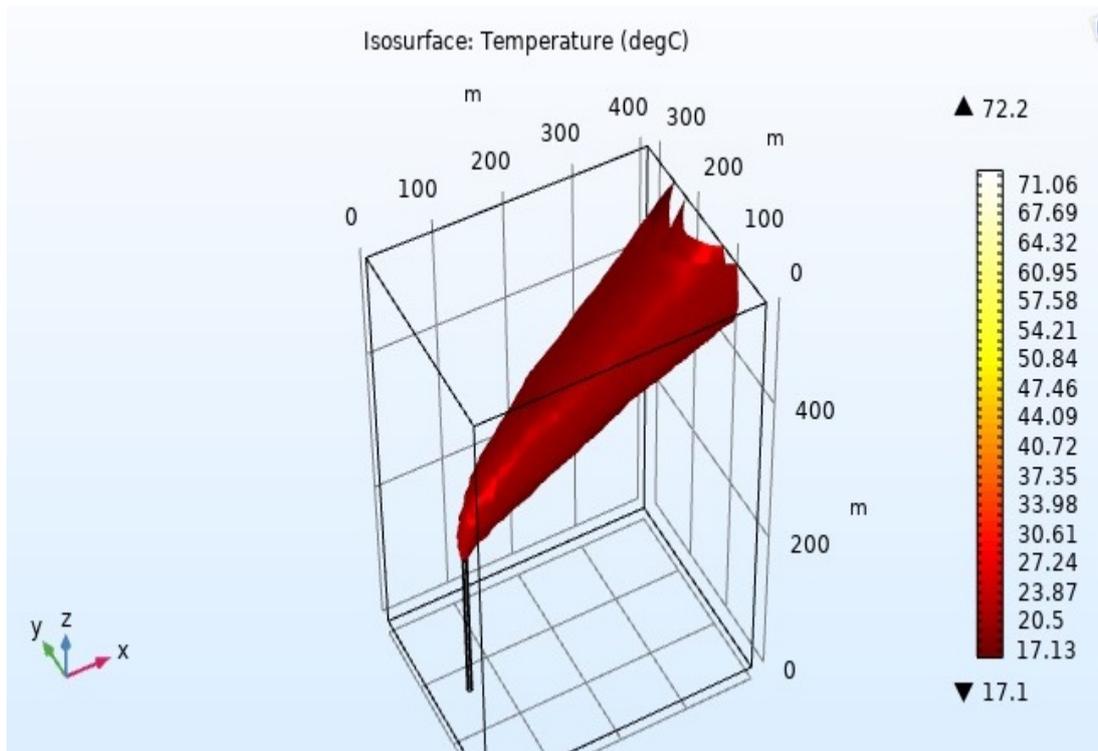


Рисунок 8 – Распределение температуры газового потока

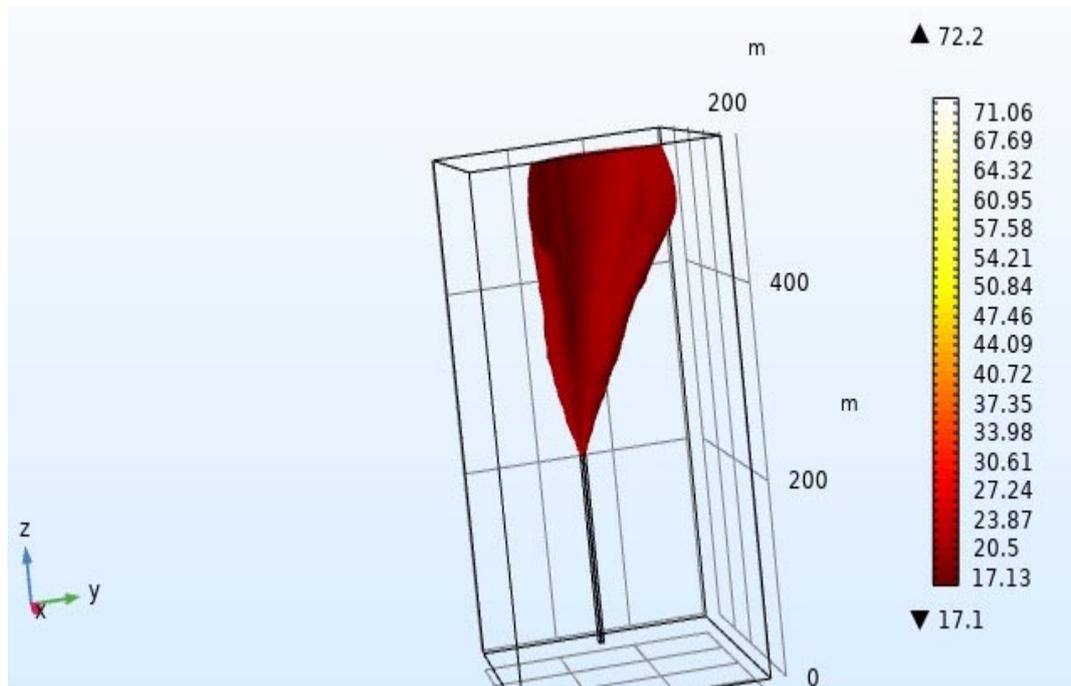


Рисунок 8a – Распределение температуры газового потока

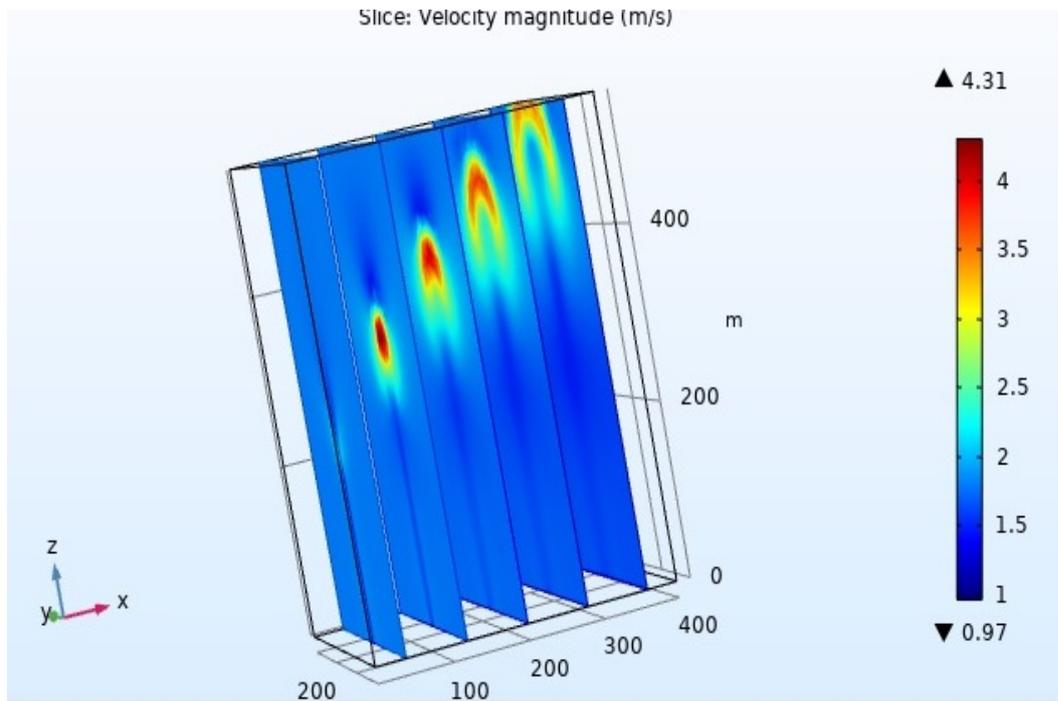


Рисунок 9 – Скорость движения газового потока

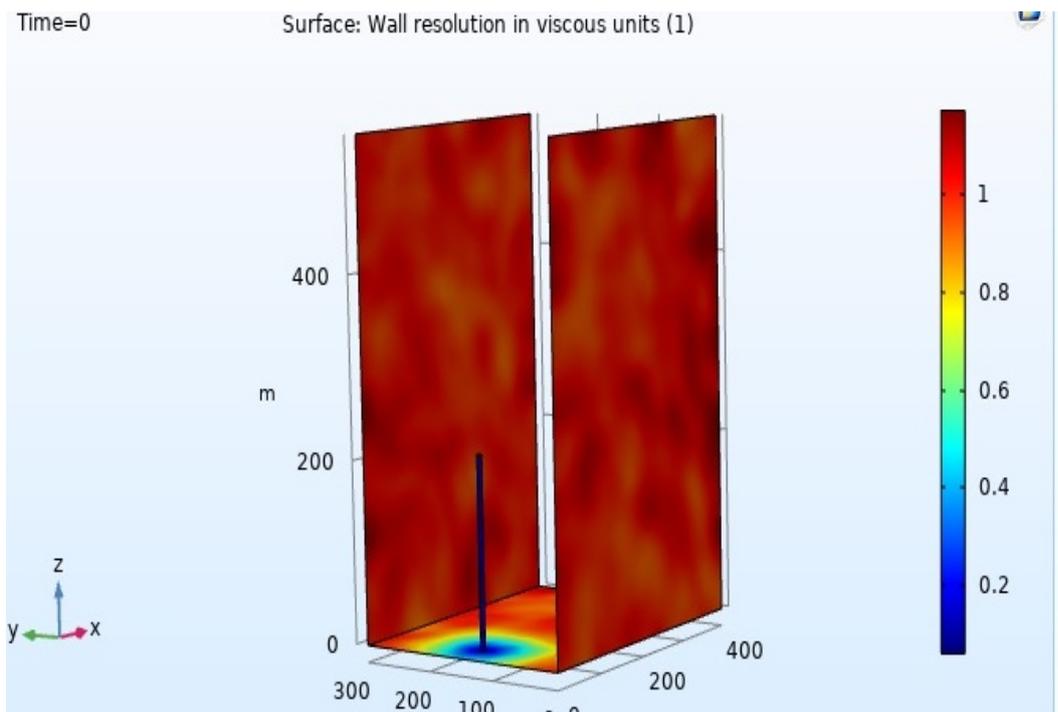


Рисунок 10 – Расчетная область

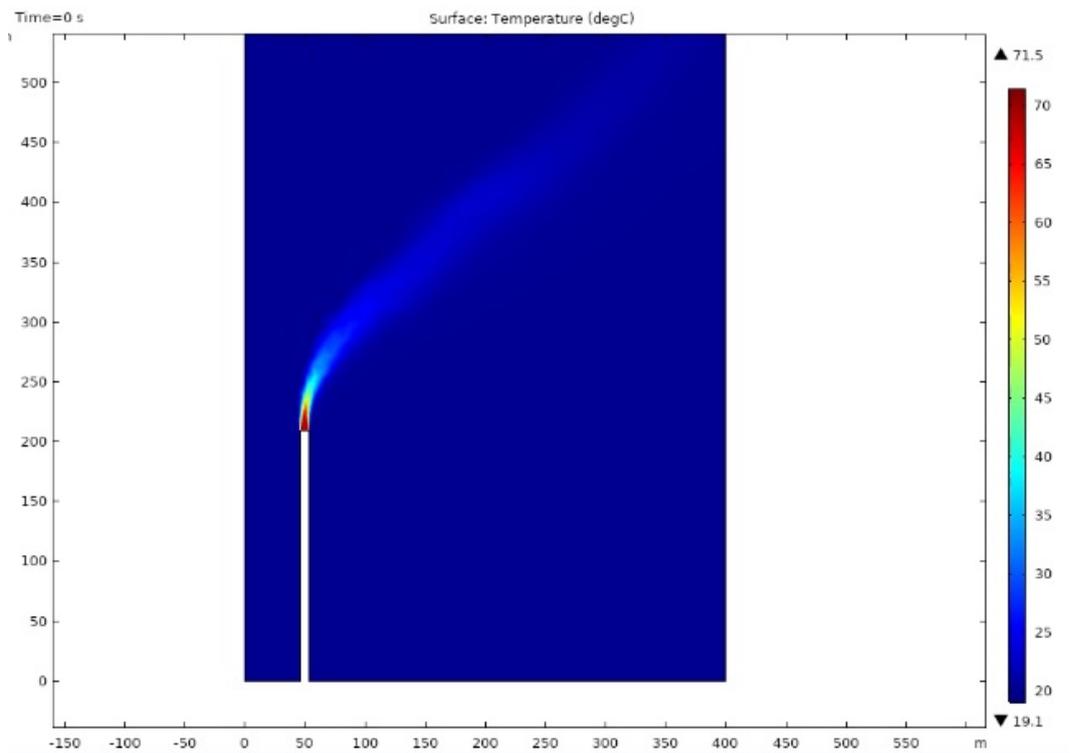


Рисунок 11 – Температурное распределение газового потока в 2D постановке

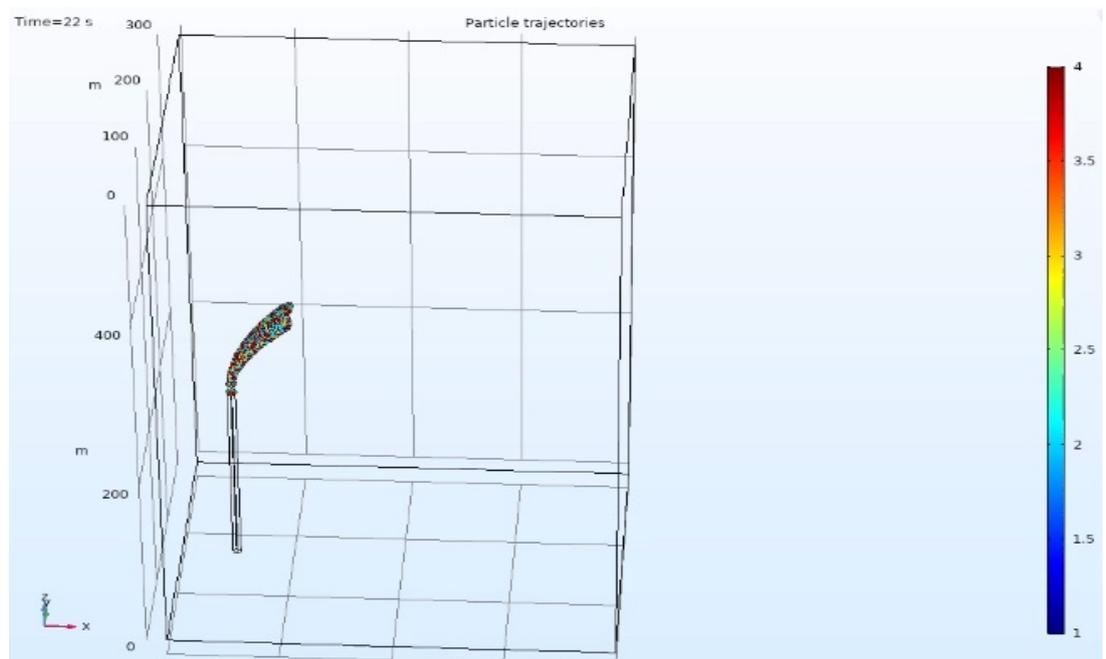


Рисунок 12 – Действие источника

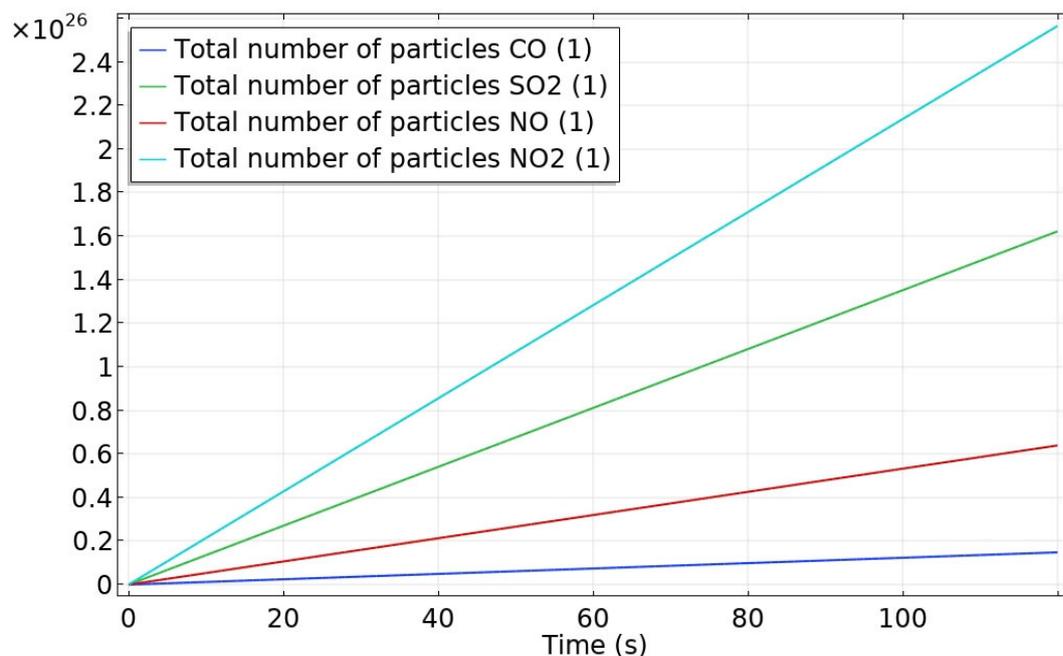


Рисунок 13 – Зависимость концентрации загрязняющих частиц от времени за май месяц 2018 г.

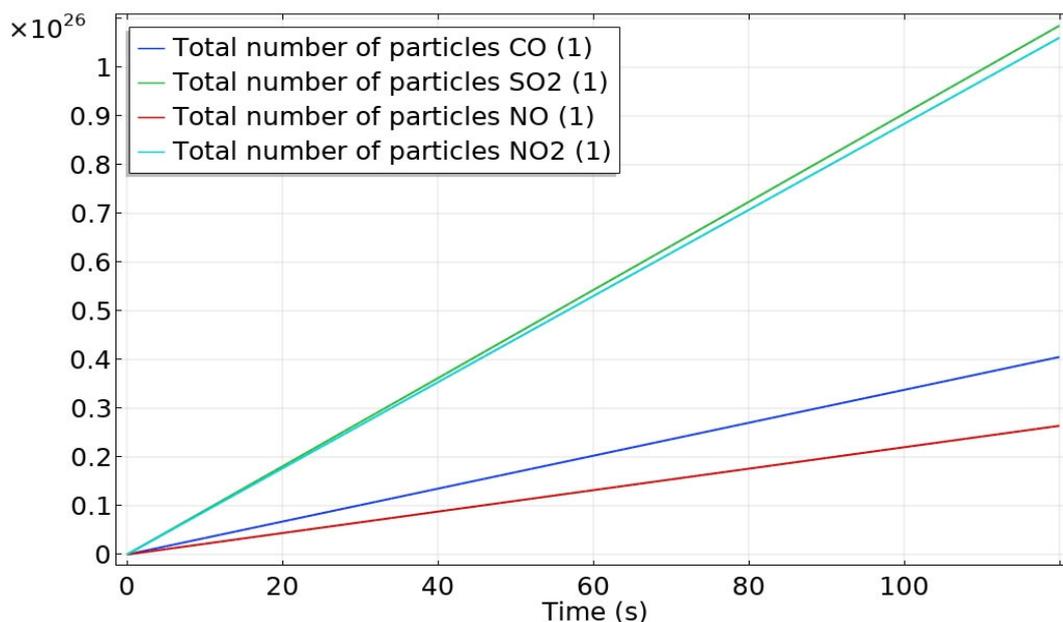


Рисунок 14 – Зависимость концентрации загрязняющих частиц от времени за ноябрь месяц 2018 г.

В третьей главе изложено численное решение уравнения турбулентной диффузии удовлетворяющему граничным условиям. Представлена программная реализация.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В магистерской диссертации изучены нелинейные модели диффузионных процессов математической физики. Рассмотрены некоторые из видов известных уравнений описывающих диффузионные и конвективные процессы различной физической природы.

Проведен обзор и анализ математических моделей процессов диффузии и конвекции. Реализован алгоритм поиска коэффициентов Фурье для двухкомпонентной среды в ППП *MatLab*. Проведено тестирование и отладка программы с варьированием параметров и анализ вычислений.

Получено численное решение уравнения турбулентной диффузии. Разработана программа, предназначенной для выявления закономерностей распространения газообразных и твердых частиц продуктов сгорания, учитывая особенности трубы, окружающей среды и продуктов сгорания для протокола испытаний Благовещенской ТЭЦ в *COMSOL Multiphysics*.

Научная и практическая значимость магистерской диссертации: математическое моделирование процесса распространения продуктов сгорания ТЭЦ из трубы в окружающую среду может активно использоваться при решении широкого класса экологических задач. Полученные результаты можно применять при конструировании промышленных и жилых объектов с целью уменьшения вреда для населения и окружающей среды в целом; численные решения могут быть использованы при проведении протоколов испытаний для АО «Дальневосточная генерирующая компания» и при преподавании дисциплин по прикладной математике.

Апробация результатов исследования: основные результаты работы были апробированы и докладывались на Российской национальной конференции «Современные проблемы науки» (Благовещенск, АмГУ, 2017), региональной научно-практической конференции «Молодежь XXI века: шаг в будущее» (Благовещенск, АмГУ, 2018,2019). Основные положения исследования опубликованы в трех работах (в одной статье и в двух тезисах докладов).

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

- 1 Берлянд, М.Е. Прогноз и регулирование загрязнений атмосферы / М.Е. Берлянд. – Л. : Гидрометеиздат, 1985. – 272 с.
- 2 Семенчин, Е.А., Ионисян, А.С. О распространении активной примеси в атмосфере диффузии / Е.А. Семенчин, А.С. Ионисян // Совершенствование методов управления социально-экономическими процессами и их правовое регулирование. – Ставрополь : Изд-во СИУ. – 2001. – С.135-137.
- 3 Семенчин, Е.А., Ионисян, А.С. Об уточнении математической модели рассеяния примеси в атмосфере / Е.А. Семенчин, А.С. Ионисян // Обзорение прикладной и промышленной математики. – Т.9. – выпуск 2. – М. : ОПиПМ, 2002. – С.444-445.
- 4 Брук, В.В., Берешко, И.Н. Математические модели в экологии ч.2 Учебное пособие / В.В. Брук, И.Н. Берешко. – Харьков: Нац. аэрокосм. ун-т, 2006. – 68 с.
- 5 Латыпова, Н.В. Ряды Фурье: учеб.-метод. пособие / Н.В. Латыпова, Л.И. Тучинский. – Ижевск: Издательство «Удмуртский университет», 2011. – 80 с.
- 6 Агошков, И.Н. Методы решения задач математической физики: учебное пособие для студентов, специализирующихся в области вычислительной математики / И.Н. Агошков, 2002. – 320 с.
- 7 Замай, С.С., Якубайлик, О.Э. Модели оценки и прогноза загрязнения атмосферы промышленными выбросами в информационно – аналитической системе природоохранных служб крупного города / С.С. Замай, О.Э. Якубайлик. – Красноярск: Краснояр. гос. ун-т., 1998. – 109 с.
- 8 Ионисян А.С., Тоторкулов, Х.А. О гауссовой модели распространения примеси в атмосфере / А.С. Ионисян, Х.А. Тоторкулов // Ученые записки физико-математического факультета Ставропольского государственного университета. – Ставрополь: Изд-во СГУ. –2002. – С.118-120.

9 Федосеев, А.А. Распространение примесей в приземном слое атмосферы / А.А. Федосеев // Тезисы докладов Дальневосточной математической школы-семинара им. академика Е.В. Золотова., Владивосток : Дальнаука, 2002 – с. 59-60.

10 Жаботинский, А.М. Концентрационные автоколебания / А.М. Жаботинский. – М., 1974. – 169 с.

11 Жаботинский, А.М. Концентратные колебания / А.М. Жаботинский. – М. : Наука, 1974. – 179 с.

12 Зельдович, Я.Б. Элементы математической физики / Я.Б. Зельдович, А.Д. Мышкис. – М. : Наука, 2014. – 360 с.

13 Сысолятин А.А., Труфанова Т.В. Решение краевой задачи для системы одномерных квазилинейных уравнений// Материалы Российской национальной конференции с международным участием: Современные проблемы науки, Благовещенск: АмГУ. –2017. – С 33-36.

14 Сысолятин А.А. Математическое моделирование нелинейного диффузионного процесса// Материалы региональной научно-практической конференции "Молодежь XXI века: шаг в будущее". Т3. Благовещенск: АмГУ. –2019 – С 59 – 60.

15 Зорич, В.А. Математический анализ: Ч. 2 / В.А. Зорич. – Издательство 4-е, испр. – М. : МЦНМО, 2002. – 794 с.

16 Курдюмов, С.Н. Автомодельные решения квазилинейного уравнения теплопроводности с распределенной плотностью и нелинейными объемными источниками / Дифференциальные уравнения / С.Н. Курдюмов, М.И. Гуревич, О.В. Гельковскаяю. – 1995. – 30 с.

17 Басараб, М.А. Численно-аналитический метод решения двумерных задач естественной конвекции в замкнутых полостях / М.А. Басараб. – М. : Издательство МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2009. – 790 с.

18 Мартинсон, Л.К. Дифференциальные уравнения математической физики: учебник для втузов / Л.К. Мартинсон, Ю.И. Малов. – М.: Издательство МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2011. – 368с.

- 19 Полянин, А.Д. Справочник по нелинейным уравнениям математической физики. Точные решения / А.Д. Полянин. – М. : Физико-математическая литература, 2002. – 431 с.
- 20 Польш, Р.В. Механика, акустика и учение о теплоте / Р.В. Польш. – М. : Наука, 1971. – 480 с.
- 21 Тихонов, А.Н. Уравнения математической физики / А.Н. Тихонов, А.А. Самарский. – М. : Наука, 2004. – 798 с.
- 22 Русак, В.Н. Математическая физика / В.Н. Русак. – Минск : Издательство «Дизайн про», 1998. – 207 с.
- 23 Самарский, А.А. Аддитивные схемы для задач математической физики / А.А. Самарский, П.Н. Вабищевич. – М. : Наука, 2001.
- 24 Самарский, А.А. Численные методы решения задач конвекции-диффузии / А.А. Самарский, П.Н. Вабищевич. – М. : Эдиториал УРСС, 1999. – 248 с.
- 25 Самарский, А.А. Теория разностных схем / А.А. Самарский. – М. : Наука, 1983. – 355 с.
- 26 Семенчин, Е.А., Ионисян А.С. Об оценке мощности мгновенного точечного источника примеси / Е.А. Семенчин, А.С. Ионисян // Математическое моделирование в научных исследованиях. Материалы Всероссийской научной конференции. – Ставрополь : Изд-во СГУ. – 2000. – С.74-76.
- 27 Семенчин, Е.А., Ионисян, А.С. Об одном способе численного решения уравнения переноса частиц примеси в атмосфере / Е.А. Семенчин, А.С. Ионисян // Успехи современного естествознания. — М. : Изд-во «Академия Естествознания», 2003. – С.77.
- 28 Семенчин, Е.А., Ионисян, А.С. Об одном способе численного решения полуэмпирического уравнения турбулентной диффузии / Е.А. Семенчин, А.С. Ионисян // Обзорение прикладной и промышленной математики. Т.10. – М. : ОПиПМ. – 2003. – С 216-217.

29 Семенчин, Е.А. Аналитические решения краевых задач в математической модели атмосферной диффузии / Е.А. Семенчин. – Ставрополь : Изд-во СКИ-УУ, 1993. – 141 с.

30 Федосеев, А.А., Булгаков, В.К. Численное моделирование распространения продуктов сгорания ТЭЦ в приземных слоях атмосферы в трёхмерной постановке / А.А. Федосеев, В.К. Булгаков // Сборник трудов международной научной конференции: Фундаментальные и прикладные вопросы механики. – Хабаровск : ХГТУ. –2003. – С 225-234.

31 Patankar, S.V., Baliga, B.R. A New Finite-Difference Scheme for Parabolic Differential Equations / S.V. Patankar, B.R. Baliga // Num. Heat Transfer. – 1979. – p. 27.

32 Patankar S.V., Ivanovic M., Sparrow E.M., Analysis of Turbulent Flow and Heat Transfer in Internally Finned Tubes and Annuli / S.V. Patankar, M. Ivanovic, E.M. Sparrow. – J. Heat Transfer. – 1979, p. 29.

ПРИЛОЖЕНИЕ А  
Листинг реализации алгоритма

Листинг программы:

```
function two_waves
clc; clear all; clf;
% начальные данные
A=2.1; B=5.2;
u1=2; u2=2.3;
L=1; % длина интервала
step=0.01;
x=0.:step:L;
% функции
f1=@(u1,u2)(A-(B+1)*u1+u1.^2.*u2);
f2=@(u1,u2)(B*u1-u1.^2.*u2);
% начальные значения
F1=zeros(1,L/step+1);
F2=zeros(1,L/step+1);
F1(1)=f1(u1,u2); F2(1)=f2(u1,u2);
K=500; N=21;
a1=zeros(K,N); a2=zeros(K,N);
for k=2:K
    [u1, u2,a1,a2]=uuu(k,L, a1, a2,F1, F2,u1,u2, x);
    F1=f1(u1,u2); F2=f2(u1,u2);
    F1(1)=a1(1)/2; F2(1)=a2(1)/2;
    plot(x,u1,'r', x,u2,'b'); grid on;
    ylim([-5 10]);
    pause(0.02)
% drawnow
end
```

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ А  
Листинг реализации алгоритма

```
disp('finish')
function [u1,u2,a1,a2]=uuu(k,L,a1,a2,F1, F2, u1,u2,xL)
N=21; tau=0.1; D1=4.4e-3; D2=2.2e-3;
phi1=zeros(1,N); phi2=zeros(1,N);
for n=1:N % расчет гармоник
    phi1(n) = 2/L*trapz(xL,F1.*cos(n*pi*xL./L));
    phi2(n) = 2/L*trapz(xL,F2.*cos(n*pi*xL./L));
end
sum_a1=0; sum_a2=0;
for n=1:N
    znam1=tau*D1*(pi*n/L)^2+1;
    znam2=tau*D2*(pi*n/L)^2+1;
    a1(k,n)=(a1(k-1,n)+tau*phi1(n))/znam1;
    a2(k,n)=(a2(k-1,n)+tau*phi2(n))/znam2;
    sum_a1=sum_a1+a1(k,n)*cos(n*pi*xL/L);
    sum_a2=sum_a2+a2(k,n)*cos(n*pi*xL/L);
end
u1=u1+sum_a1;
u2=u2+sum_a2;
```

ПРИЛОЖЕНИЕ Б  
Листинг реализации алгоритма

Листинг программы:

```
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include <fstream>
#include <math.h>

using namespace std;
const char * fname = "q.txt";
const int NX = 20;
const int NY = 20;
const int NZ = 15;

const double h = 10.0;
const double tau = 0.1;
const double Q0 = 0.5;
const double T = 500.0;
const double h2 = h*h;
double QS(int x, int y, int z, double t) {
if (x == NX/2 && y == NY/2 && z == 1)
    return Q0*(1.0 - 0.1*exp(-t));
else
    return 0.0;
}

double UU(double x, double y, double z, double t) {
return 0.1*x/(t + 0.5);
}

double KX(double x, double y, double z) {
```

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б  
Листинг реализации алгоритма

```
    return 0.01*x;
}

double KY(double x, double y, double z) {
    return 0.005*y;
}

double KZ(double x, double y, double z) {
    return 0.01*(5*NZ*h - z);
}

int main() {
    double kx[NX][NY][NZ];
    double ky[NX][NY][NZ];
    double kz[NX][NY][NZ];
    for (int x = 0; x < NX; x++)
        for (int y = 0; y < NY; y++)
            for (int z = 0; z < NZ; z++) {
                kx[x][y][z] = KX(x*h, y*h, z*h);
                ky[x][y][z] = KY(x*h, y*h, z*h);
                kz[x][y][z] = KZ(x*h, y*h, z*h);
            }

    // Ñîðîíîö
    double u[NX][NY][NZ];
    double Q[NX][NY][NZ];
    double q[NX][NY][NZ] = { 0.0 };
    double qp[NX][NY][NZ] = { 0.0 };
    double t = 0.0;
    while (t <= T) {
        for (int x = 0; x < NX; x++)
```

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б  
Листинг реализации алгоритма

```
for (int y = 0; y < NY; y++)
for (int z = 0; z < NZ; z++)
Q[x][y][z] = QS(x, y, z, t);
for (int x = 0; x < NX; x++)
for (int y = 0; y < NY; y++)
for (int z = 0; z < NZ; z++)
u[x][y][z] = UU(x*h, y*h, z*h, t);
double up[NX][NY][NZ] = { 0.0 };
double um[NX][NY][NZ] = { 0.0 };
for (int x = 0; x < NX; x++)
for (int y = 0; y < NY; y++)
for (int z = 0; z < NZ; z++)
if (u[x][y][z] < 0.0)
um[x][y][z] = u[x][y][z];
else
up[x][y][z] = u[x][y][z];
for (int y = 1; y < NY - 1; y++)
for (int z = 1; z < NZ - 1; z++) {
double H[NX];
double L[NX];
H[1] = 0.0;
L[1] = 0.0;
for (int x = 1; x < NX - 1; x++) {
double V1 = 1.0 + tau/h*(up[x][y][z] - um[x][y][z]) +
tau/2/h2*(kx[x-1][y][z] + 2.0*kx[x][y][z] + kx[x+1][y][z]);
double V2 = tau*((kx[x+1][y][z]+kx[x][y][z])/2/h2 - um[x][y][z]/h);
double V3 = tau*((kx[x][y][z]+kx[x-1][y][z])/2/h2 + up[x][y][z]/h);
```

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б  
Листинг реализации алгоритма

```
double Z = V1 - H[x]*V3;
H[x+1] = V2/Z;
L[x+1] = (L[x]*V3 + qp[x][y][z] + tau/3.0*Q[x][y][z])/Z;
}

q[NX - 1][y][z] = 0.0;
for (int x = NX - 2; x >= 0; x--)
q[x][y][z] = H[x+1]*q[x+1][y][z] + L[x+1];
}

for (int x = 0; x < NX; x++)
for (int z = 0; z < NZ; z++)
q[x][0][z] = q[x][1][z];
for (int x = 0; x < NX; x++)
for (int y = 0; y < NY; y++)
for (int z = 0; z < NZ; z++)
qp[x][y][z] = q[x][y][z];
for (int x = 1; x < NX - 1; x++)
for (int z = 1; z < NZ - 1; z++) {
double H[NY];
double L[NY];
H[1] = 1.0;
L[1] = 0.0;
for (int y = 1; y < NY - 1; y++) {
double V1 = 1.0 + tau/2/h2*(ky[x][y-1][z] + 2.0*ky[x][y][z] + ky[x][y+1][z]);
double V2 = tau*((ky[x][y+1][z]+ky[x][y][z])/2/h2);
double V3 = tau*((ky[x][y][z]+ky[x][y-1][z])/2/h2);
double Z = V1 - H[y]*V3;
H[y+1] = V2/Z;
```

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б  
Листинг реализации алгоритма

```
L[y+1] = (L[y]*V3 + qp[x][y][z] + tau/3.0*Q[x][y][z])/Z;}
q[x][NY - 1][z] = 0.0;
for (int y = NY - 2; y >= 0; y--)
q[x][y][z] = H[y+1]*q[x][y+1][z] + L[y+1];
}

for (int x = 0; x < NX; x++)
for (int y = 0; y < NY; y++)
for (int z = 0; z < NZ; z++)
qp[x][y][z] = q[x][y][z];
for (int y = 1; y < NY - 1; y++)
for (int x = 1; x < NX - 1; x++) {
double H[NZ];
double L[NZ];
H[1] = 0.0;
L[1] = 0.0;
for (int z = 1; z < NZ - 1; z++) {
double V1 = 1.0 + tau/2/h2*(kz[x][y][z-1] + 2.0*kz[x][y][z] + kz[x][y][z+1]);
double V2 = tau*((kz[x][y][z+1]+kz[x][y][z])/2/h2);
double V3 = tau*((kz[x][y][z]+kz[x][y][z-1])/2/h2);
double Z = V1 - H[z]*V3;
H[z+1] = V2/Z;
L[z+1] = (L[z]*V3 + qp[x][y][z] + tau/3.0*Q[x][y][z])/Z;
}
q[x][y][NZ - 1] = 0.0;
for (int z = NZ - 2; z >= 0; z--)
q[x][y][z] = H[z+1]*q[x][y][z+1] + L[z+1];
}
```

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б  
Листинг реализации алгоритма

```
for (int x = 0; x < NX; x++)
for (int z = 0; z < NZ; z++)
q[x][0][z] = q[x][1][z];
for (int x = 0; x < NX; x++)
for (int y = 0; y < NY; y++)
for (int z = 0; z < NZ; z++)
qp[x][y][z] = q[x][y][z];
t += tau;
}
ofstream out(fname);
if (out) {
for (int z = 0; z < NZ; z++) {
for (int y = 0; y < NY; y++) {
for (int x = 0; x < NX; x++)
out << setprecision(9) << setw(16) << q[x][y][z];
out << endl;
}
out << endl;
}
out.close();
return 0;
}
```