УДК 517.956.4

РЕАКЦИОННО-ДИФФУЗИОННАЯ МОДЕЛЬ ПЕРЕНОСА ЗАГРЯЗНЕНИЙ В ПОГРАНИЧНОМ СЛОЕ АТМОСФЕРЫ

Тахиров А. Ж.
al.takhirov@gmail.com
Институт математики им. В. И. Романовского АН РУз, г. Ташкент, ул. Мирзо Улугбека, 81

В работе предлагается математическая модель в виде уравнения реакции-диффузии переноса и диффузии вредных веществ в пограничных слоях атмосферы.

Рассмотрены вопросы устойчивости, единственности и существование решения. Предложен алгоритм решения с применением расщепления трехмерной задачи.

Ключевые слова: параболическое уравнение, априорные оценки, краевая задача

Цитирование: *Тахиров А. Ж.* Реакционно-диффузионная модель переноса загрязнений в пограничном слое атмосферы // Проблемы вычислительной и прикладной математики. — 2018. — № 4(16). — С. 67–73.

1 Введение

Вопросам охраны окружающей среды посвящен большой цикл исследований, выполняемых как за рубежом [1–3], так и в нашей стране [4, 5]. Вместе с тем, в рамках этого направления остается ряд сложных в математическом отношении задач, связанных с краткосрочными прогнозами распространения загрязняющих веществ в природной среде. Оперативное решение подобных прогностических задач требует разработки нестационарных моделей массопереноса в условиях турбулентной атмосферы и создания численных методов и алгоритмов решения соответствующих математических уравнений и их систем в ограниченных пространственно-временных интервалах.

Параболические уравнения лежат в основе математических моделей самых разнообразных явлений и процессов в физике, биологии, экологии и многих других областях знаний. Общим для всех этих процессов являются перенос и диффузия концентрации в соответствующей форме и содержании [7, 8].

Известно, что активные примеси в процессе распространения в атмосфере вступает в химические реакции с водяным паром или другими компонентами атмосферы и переходит из одного химического состояние в другое, изменяя при этом характер токсичности в отношении к окружающей среде. Следовательно, считаем нужным модификация модели в виде параболического уравнения посредством включения реакционно-диффузионного члена, что приводит к так называемой логистической модели. А в настоящее время логистические модели широко применяются при описании различных физических и биологических процессов [6, 7]. Автор логистических моделей П.Ферхюльст высказал догадку, что в случае очень быстрого роста концентрации должны включаться механизмы саморегуляции. Квадратический член в правой части уравнения отражает внутреннего взаимодействия, которое ограничивает рост концентрации.

Пусть Ω - ограниченная область в R^3 с гладкой границей $\partial\Omega$, $Q_T = \Omega\times(0,T), S_T = \partial\Omega \times (0,T), T > 0$.

В настоящей работе рассматривается процесс диффузионного переноса загрязненй в пределах пограничного слоя атмосферы, которая описывается краевой задачей для трехмерного параболического уравнения (процесс исследуется вдали от источника)

$$\frac{\partial u(P,t)}{\partial t}-\left[\frac{\partial}{\partial x}(d_2(P,t)u_x(P,t))-\frac{\partial}{\partial y}(d_3(P,t)u_y(P,t))+\frac{\partial}{\partial z}(d_1(P,t)u_z(P,t))\right]+ \\ \frac{\partial}{\partial x}(c_2(P,t)u)+\frac{\partial}{\partial y}(c_3(P,t)u)+\frac{\partial}{\partial z}(c_1(P,t)u)=u(a-bu) \text{ в } Q_T. \tag{1}$$

Перепишем уравнение (1) в виде

$$Lu\equiv L_0u-u_t\equiv(d_2u_{xx}+d_3u_{yy}+d_1u_{zz})+a_2u_x+a_3u_y+d_1u_z-cu-u_t=bu^2 \text{ в } Q_T \tag{2}$$

и задается начальное и граничные условия

$$u(P,0)=\varphi(P), P\in\Omega, \tag{3}$$

$$u(P,t)=\psi(P,t) \text{ на } S_T, \tag{4}$$

где

$$P=P(x,y,z), P\in\Omega\subset R^3, t\in[0,T],$$
$$a_2(P,t)=d_{2x}(P,t)-c_2(P,t), a_3(P,t)=d_{3y}(P,t)-c_3(P,t),$$
$$a_1(P,t)=d_{1z}(P,t)-c_1(P,t), c(P,t)=c_{2x}+c_{3y}+c_{1z}-a.$$

Здесь $u(P,t)$ - концентрация примесей, имеющихся в точке P в момент t, a,b - положительные постоянные, причем a - степень вывода или привнесения примесей в данный объем за счет химических процессов, b - скорость изменения концентрации, $d_i(i=\overline{1,3})$ - коэффициенты турбулентной диффузии, $c_i(i=\overline{1,3})$ - компоненты вектора скорости ветра.

Предполагаются выполненными следующие условия:

I. $d_i(P,t)\geqslant d_{i0}>0, c_i(P,t)(i=\overline{1,3}), \psi_1(P,t)$ - непрерывно дифференцируемые функции, производные которых удовлетворяют условию Гельдера в $\overline{Q_T}$;

II. $\varphi(P)\in C^{2+\alpha}(\Omega)$ и удовлетворяет условию согласования первого порядка на $\partial\Omega$;

III. $\varphi_0(P)\geqslant 0, \psi(P,t)\geqslant 0$, причем $\max\limits_{S_T}|\psi|\leqslant\max\limits_{\Omega}|\varphi|$.

Всюду в работе используем результаты работ [9, 10] и, следовательно, будем придерживаться обозначениями пространств, норм и т.п., принятых в [9, 10].

2 Исследование модели

Исследование математических моделей подразумевает прежде всего качественное изучение математических моделей и получение точного или приближенного решения. Прежде всего рассматривается проблема существование решения. Соответствующие строгие результаты дают уверенность в корректности математической модели. Важным является вопрос об устойчивости решения относительно малых возмущений входных данных. Установления априорных оценок позволяет заранее определить те или иные свойства изучаемого процесса (объекта). В этом и заключается принцип физической определенности модели.

2.1 Оценка *u(x,t)*, устойчивость и единственность решения

Сначала установим оценку (определим знак) для искомой функции $u(x,t)$, а затем докажем устойчивость и единственность решения задачи (2)-(4).

Лемма 2.1. Пусть выполнены условия I-III. Тогда справедлива оценка

$$0\leqslant u(x,t)\leqslant\max_{\Omega}(|\varphi|) \tag{5}$$

Доказательство. Воспользуемся теоремой 6 работы ([9], гл.II). Пусть $u(x,t)$ непрерывна в $\overline{Q}_T$ и $Lu \geqslant 0$ в Q_T. Тогда для каждой точки $P_0 \in Q_T$ для которой $u(x,t)$ имеет положительный максимум в $\overline{S(P_0)}$, этот максимум достигается в некоторой точке, лежащей в дополнении $S(P_0)$.

Здесь $S(P_0)$ - множество всех точек P в Q_T, таких, что их можно соединить с P_0 простой непрерывной кривой, лежащей в Q_T, вдоль которой координата t не убывает от P к P_0.

В нашем случае все условия выполняются. Это дает возможность оценить $u(x,t)$ сверху. Так как максимум достигается на $\Omega \cup S_T$, то

$$u(x,t) \leqslant \max\left(\|u_0\|, \|u_1\|\right) = \|u_0\| \leqslant K \text{ в } \overline{Q}_T. \tag{6}$$

Воспользуемся теоремой сравнении [8, 9]. Для нижнего решения $u^-(x,t) = 0$ получим задачу

$$u^-{}_t \leqslant L_0 u^-, \quad u^-(P,0) = 0, P \in \Omega, \quad u^-(P,t) = 0 \text{ на } S_T.$$

Следовательно, по теореме сравнении имеем

$$0 \leqslant u(x,t)(\leqslant K) \text{ в } \overline{Q}_T. \tag{7}$$

Лемма 2.2. Пусть два решения уравнения (2) $u_1(x,t)$ и $u_2(x,t)$ удовлетворяют условиям:

1. Если $u_1(x,0) \leqslant u_2(x,0), x \in \Omega, u_1(x,t) \leqslant u_2(x,t)$ на S_T, то $u_1(x,t) \leqslant u_2(x,t)$ в $\overline{Q}_T$;

2. Если $|u_1(x,t) - u_2(x,t)| \leqslant \varepsilon$ для $(x,t) \in \Omega \cup S_T$, то $|u_1(x,t) - u_2(x,t)| \leqslant \varepsilon$ в $\overline{Q}_T$;

3. Если три решения уравнения (2) $u(x,t), \underline{u}(x,t), \overline{u}(x,t)$ удовлетворяют условиям $\underline{u}(x,t) \leqslant u(x,t) \leqslant \overline{u}(x,t)$ для $(x,t) \in \Omega \cup S_T$, то эти неравенства выполняются в $\overline{Q}_T$.

Доказательство. Предполагаем существование двух решений и для их разности $v(x,t) = u_2(x,t) - u_1(x,t)$ получим задачу

$$d_2 v_{xx} + d_3 v_{yy} + d_1 v_{zz} + a_2 v_x + a_3 v_y + a_1 v_z - (c - b(u_1 + u_2))v - v_t = 0,$$
$$v(x,0) \geqslant 0,\ x \in \Omega, \quad v(x,t) \geqslant 0 \text{ на } S_T.$$

В силу (7) коэффициент при $v(x,t)$ является органиченной функцией. Тогда по принципу максимума получим $v(x,t) \geqslant 0$ в Q_T, т.е. доказана первое утверждение леммы.

Второе утверждение является применением первого утверждения к функциям $u(x,t), \overline{u}(x,t)$ и $\underline{u}(x,t)$.

Утверждение 3 вытекает из 2, если его применить к решением $\underline{u}(x,t) = -$ $-\varepsilon, u(x,t) = u_1(x,t) - u_2(x,t), \overline{u}(x,t) = \varepsilon$.

Утверждение 3 позволяет установить устойчивость решения задачи (2)-(4). Отсюда в качесве следствии получается единственность решения задачи (2)-(4).

2.2 Существование решения

Уравнение (1) простейший тип нелинейного уравнения. Но член с $u_2(x,t)$ не дает возможность сразу применять результаты по линейной теории параболических уравнений.

По этому применяем теорему о неподвижной точке Шаудера ([9], гл.II). При этом сначала доказывается существование решения при малых значениях времени

t. Далее устанавливаются некоторые априорные оценки старших производных, которые позволяют доказать существование решения задачи шаг за шагом до наперед заданного числа T.

В этом разделе для удобства переобозначим пространственные координаты через $(x_1, x_2, x_3) = x$. Если $\bar{c} = c_1 i + c_2 j + c_3 k$ векторное поле скорости ветра, $\overline{d}$ - диада (тензор) с матрицей $\{d_{ij}\}, i, j = 1, 2, 3$, $\overline{J} = \bar{c}u - \overline{d}\nabla u$ - вектор потока переносимой субстанции, то уравнение (1) может быть записано в виде

$$\dot{u} + \mathrm{div} J = u(a - bu). \tag{8}$$

Рассмотрим задачу

$$u_t + \mathrm{div}(\bar{c}u - \overline{d}\nabla u) = h(x,t)u \text{ в } Q_T, \tag{9}$$

$$u(x,0) = \varphi(x), x \in \Omega, u(x,t) = \psi(x,t) \text{ на } S_T. \tag{10}$$

Лемма 2.3. Пусть

$$h(x,t) \in C^{\alpha,\alpha/2}(Q_T), \|h\|_{C^{\alpha,\alpha/2}(Q_T)} \leqslant A_0. \tag{11}$$

Тогда при условии I-III существует решение $u(x,t) \in C^{2+\alpha,1+\alpha/2}(Q_T)$ задачи (9), (10) при малых $T > 0$, зависящее от $\|\varphi\|_{C^{2+\alpha}(\Omega)} + 1$. Здесь A_0 - постоянная.

Доказательство. Введем Банахово пространство X функций $u(x,t)$ с нормой $\|u\|_{C^{1+\alpha,\alpha/2}(Q_T)}(0 < T < 1)$ и подмножество

$$X_B = \{u \in X : u(x,0) = \varphi(x), \|u\|_{C^{1+\alpha,\alpha/2}(Q_T)} \leqslant B\},$$

где $B = \|\varphi\|_{C^{2+\alpha}(\Omega)} + 1$. Для $u \in X_B$ определим отображение $\overline{u} = Fu$, где $\overline{u}$ является решением задачи

$$\overline{u}_t - \mathrm{div}(\overline{d}\nabla\overline{u}) - h\overline{u} = -\mathrm{div}(\bar{c}u) \text{ в } Q_T, \tag{12}$$

$$\overline{u}(x,0) = \varphi(x) > 0, x \in \Omega, \overline{u}(x,t) = \psi(x,t) \text{ на } S_T, \tag{13}$$

где $\max\limits_{S_T} |\overline{u}(x,t)| \leqslant \max\limits_{\Omega} \varphi(x)$.

В силу предположений относительно коэффициентов уравнении (1), условий (11) и $u(x,t) \in X_B$, имеем

$$f = -\mathrm{div}(\bar{c}u) \in C^{\alpha,\alpha/2}(Q_T). \tag{14}$$

Тогда при условиях I.-III. и Шаудерово параболической теории [9] существует единственное решение задачи (12), (13) и справедлива оценка

$$\|\overline{u}\|_{C^{2+\alpha,1+\alpha/2}(Q_T)} \leqslant \|\varphi\|_{C^{2+\alpha}(\Omega)} + M_1(B) = B + M_1(B) = M_2(B), \tag{15}$$

где $M_i(B)$ - постоянные, зависящие только от B.

Используя определение норм Гельдера, имеем

$$\frac{|u(x,t) - u(x,0)|}{t^{(1+\alpha)/2}} \leqslant |D_t u| \cdot |T|^{(1-\alpha)/2}, \tag{16}$$

$$\begin{gathered} \|\overline{u}(x,t) - \overline{u}(x,0)\|_{C^{1+\alpha,0}(Q_T)} \leqslant A_0 \|D_x^2 u(x,t) - D_x^2 u(x,0)\|_{L^\infty(Q_T)} \leqslant \\ A_0 \left[D_x^2 u\right]_{C^{0,\alpha/2}(Q_T)} |T|^{\alpha/2} \leqslant A_0 [u]_{C^{2,\alpha/2}(Q_T)} |T|^{\alpha/2}. \end{gathered} \tag{17}$$

Отсюда можно найти

$$\|\overline{u}(x,t)-\overline{u}(x,0)\|_{C^{1+\alpha,(1+\alpha)/2}(Q_T)} \leqslant A_0\eta(T)\|\overline{u}\|_{C^{2+\alpha,(1+\alpha)/2}(Q_T)}, \tag{18}$$

где $\eta(T)=\max\left[T^{\alpha/2},T^{(1-\alpha)/2}\right]$.

Следовательно,

$$\|\overline{u}(x,t)-u(x,0)\|_{C^{1+\alpha,\alpha/2}(Q_T)} \leqslant A_0\eta(T)\|u\|_{C^{2+\alpha,1+\alpha/2}(Q_T)}. \tag{19}$$

Комбинируя (15) и (19), находим

$$\|\overline{u}\|_{C^{1+\alpha,\alpha/2}(Q_T)} \leqslant \|\overline{u}(x,0)\|_{C^{1+\alpha,\alpha/2}(Q_T)} + A_0\eta(T)M_2(B) \leqslant \|\varphi\|_{C^{2+\alpha}(B)}+1 \leqslant B. \tag{20}$$

Таким образом доказали, что F отображает X_B в себя.

Непрерывность оператора F и компактность отображения в X следует из установленных оценков Шаудеровского типа с применением теоремы 1 работы ([9], гл.VII) и доказательство проводится как и в теореме 8 работы ([9], гл.VII).

Чтобы установить априорные оценки старших производных решения уравнении (2), необходимо доказать Гельдеровость искомой функции $u(x,t)$. Это доказывается при помощи теоремы 10.1 работы ([10], гл.III).

По условиям теоремы 10.1 [10] предполагаются равномерная параболичность уравнении (2) и L_p - гладкость коэффициентов и правой части (у нас ограниченная функция), выполнение которых обеспечиваются предположениями I.-III. и оценкой (7).

Тогда можно утверждать, что обобщение решение $u(x,t)$ уравнении (2) из пространства $V_2^{1,0}(Q_T)$ принадлежит $H^{\alpha,\alpha/2}(Q_T)$. Следовательно, (2) можно рассмотреть как линейное уравнение с переменными коэффициентами и правой частью, удовлетворяющие условиям Гельдера.

Тогда справедлива теорема.

Теорема 2.2. Пусть выполнены условия I.-III. Тогда существует единственное решение задачи (2)-(4) из $C^{2+\alpha,1+\alpha/2}(Q_T)$ и справедлива оценка $\|u\|_{C^{2+\alpha,1+\alpha/2}(Q_T)} \leqslant A$.

3 Алгоритм решения

В этом разделе строится алгоритм для реализации модели на вычислительной машине. Модель представляется в форме, удобной для применения численных методов, определяется последовательность вычислительных и логических операций.

Применяем метод покоординатного расщепления трехмерной задачи на систему трех связных одномерных подзадач [11, 12], соответствующих переносу субстанции вдоль координатных осей $\boldsymbol{Oz}, \boldsymbol{Ox}, \boldsymbol{Oy}$ в пределах временного интервала $t\in[t_j,t_{j+1}]$. Величина $\Delta t_j = t_{j+1}-t_j$ считается "достаточно малой".

Задача I.

$$\frac{\partial u_1}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial z}(c_1u_1)-\frac{\partial}{\partial z}\left(d_1\frac{\partial u_1}{\partial z}\right)=\omega_1 f(u_1,t), \tag{21}$$

$$u_1(P,t_j)=\begin{cases}\varphi(P),\ j=0,\ P\in\Omega,\\ u_3(P,t_j),\ j=1,2...\end{cases} \tag{22}$$

$$u_1(P,t_j)=\psi(P,t_j),\ P\in\partial\Omega,\ t_j\leqslant t\leqslant t_{j+1}.$$

Задача II.

$$\frac{\partial u_2}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}(c_2u_2)-\frac{\partial}{\partial x}\left(d_2\frac{\partial u_2}{\partial x}\right)=\omega_2 f(u_2,t), \tag{23}$$

$$
\begin{gathered}
u_2(P,t_j)=u_1(P,t_{j+1}),\ P\in\Omega,\\
u_2(P,t_j)=\psi(P,t_{j+1}),\ P\in\partial\Omega,\ j=0,1,2...
\end{gathered}
\tag{24}
$$

Задача III.

$$
\frac{\partial u_3}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial y}(c_3u_3)-\frac{\partial}{\partial y}\left(d_3\frac{\partial u_3}{\partial y}\right)=\omega_3 f(u_3,t),
\tag{25}
$$

$$
\begin{gathered}
u_3(P,t_j)=u_2(P,t_{j+1}),\ P\in\Omega,\\
u_3(P,t_j)=\psi(P,t_j),\ P\in\partial\Omega,
\end{gathered}
\tag{26}
$$

где $f(u,t)=u(a-bu),\omega_1+\omega_2+\omega_3=1.$

В качестве решения исходного уравнения (1) применяется

$$
u(P,t)=u_3(P,t),\ t_j\leqslant t\leqslant t_{j+1}.
$$

Обоснование вышеизложенного алгоритма проводится как в [12]. Доказана, что найденное решение $u(x,t)$ удовлетворяет уравнению (1) и условиям (3), (4).

Литература

[1] *Марчук Г.И.* Математическое моделирование в проблемах окружающей среды // М.: Наука, 1982. 320 с.

[2] *Yaglom A.M.* Hydrodynamic instability and transition to turbulence // Springer, 2012. 610 p.

[3] *Берлянд М.Е.* Современные проблемы атмосферной диффузии и загрязнения атмосферы // Л.: Гидромет., 1975. 448 с.

[4] *Ravshanov N.* Mathematical model for the study and forecast of the concentration of harmful substances in the atmosphere // Amer.J.of modeling and optimization, 2015. V.3, N.2, pp.35-39.

[5] *Равшанов Н., Шарипов Д.* Конструктивная системная методология математического моделирования и вычислительного эксперимента в проблеме охраны окружающей среды // Т.: Фан ва техн., 2013. 152 с.

[6] *Cantrell R.S., Costner C.* Spatial Ecology via Reaction-Diffusion Equations // John Wiley and Sons Ltd., 2003. 411 p.

[7] *Pao C.V.* Nonlinear parabolic and elliptic equations // New York: Plenum Press, 2003. 780 p.

[8] *Самарский А.А. и др.* Режимы с обострением в задачах для квазилинейных параболических уравнений // М.:Мир, 1968. 480 с.

[9] *Фридман А.* Уравнения с частными производными параболического типа // М.:Мир, 1968. 428 с.

[10] *Ладыженская О. А., Солонников В. А., Уральцева Н. Н.* Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа // М.:Наука, 1967. 736 с.

[11] *Марчук Г.И.* Методы расщепления // М.: Наука, 1988. 264 с.

[12] *Наац В.И, Наац И.Э.* Математические модели и численные методы в задачах экологического мониторнга атмосферы // М.: Физмат., 2009. 328 с.

Поступила в редакцию 07.05.2018

UDC 517.956.4

REACTION-DIFFUSION MODEL OF THE SPREAD OF POLLUTION IN THE BOUNDARY LAYER OF THE ATMOSPHERE

Takhirov A. J.
al.takhirov@gmail.com
Institute of Mathematics named after V. I. Romanovskiy NAS RUz, 81 Mirzo Ulugbek st., Tashkent, Uzbekistan

The paper proposes a mathematical model in the form of the equation of reaction-diffusion of transport and diffusion of harmful substances in the boundary layers of the atmosphere.

The problems of stability, uniqueness, and the existence of a solution are considered. An algorithm for solving the problem using the splitting of the three-dimensional problem is proposed.

Keywords: parabolic equation, a priori estimates, boundary value problem

Citation: Takhirov A. J. 2018. Reaction-diffusion model of the spread of pollution in the boundary layer of the atmosphere. *Problems of Computational and Applied Mathematics.* 4(16): 67–73.

References

[1] Marchuk G.I. 1982. Mathematical modeling in environmental problems. *M.: Nauka.* 320 p.

[2] Yaglom A.M. 2012. Hydrodynamic instability and transition to turbulence // *Springer.* 610 p.

[3] Berliand M.E. Modern problems of atmospheric diffusion and air pollution // *L.: Hydromet.*, 1975. 448 p.

[4] Ravshanov N. 2015. Mathematical model for the study and forecast of the concentration of harmful substances in the atmosphere // *Amer.J.of modeling and optimization.* V.3, N.2, pp.35-39.

[5] Ravshanov N., Sharipov D. 2013. Constructive system methodology of mathematical modeling and computational experiment in the problem of environmental protection // *T.: Fan va texn.* 152 p.

[6] Cantrell R.S., Costner C. 2003. Spatial Ecology via Reaction-Diffusion Equations. *John Wiley and Sons Ltd.* 411 p.

[7] Pao C.V. 2003. Nonlinear parabolic and elliptic equations. *New York: Plenum Press.* 780 p.

[8] Samarskiy A.A. etc. 1968. Blow-Up in Quasilinear Parabolic Equations. *M.:Mir.* 480 p.

[9] Friedman A. 1968. Partial Differential Equations of Parabolic Type. *M.:Mir.* 428 p.

[10] Ladyzhenskaya O. A., Solonnikov B. A., Uralceva N. N. 1967. Linear and Quasilinear Equations of Parabolic Type. *M.:Nauka.* 736 p.

[11] Marchuk G.I. 1988. Splitting methods. *M.: Nauka.* 264 p.

[12] Naatz B.I, Naatz I.E. 2009. Mathematical models and numerical methods in problems of environmental atmospheric monitoring. *M.: Fizmat.* 328 p.

Received May 07, 2018