

Численная схема реализации малокомпонентной модели трансформации примесей в атмосфере

Выполнила:

Калашникова В.Л.

Научный руководитель:

Д.ф.-м.н., профессор Пененко В.В.

Введение

- **В настоящее время существует множество численных схем, основанных на методах типа Рунге-Кутты и Розенброка, для реализации моделей трансформации примесей в атмосфере.**
- **Главным требованием к численным схемам для моделей трансформации примесей является безусловная положительность физических величин.**

Постановка задачи

Рассматриваются уравнения трансформации примесей в атмосфере

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} + P_i(\varphi)\varphi_i = D_i(\varphi) + f_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (1)$$

где $\varphi = (\varphi_1, \dots, \varphi_n)$ обозначается вектор из n компонент;

$\varphi_i(t) \geq 0$ - непрерывная функция,

определяющая концентрацию i -ой примеси;

n - количество примесей;

$P_i(\varphi)\varphi_i \geq 0$ и $D_i(\varphi) \geq 0$ - процессы деструкции и продукции примесей;

f_i - источник эмиссии i -го вещества в момент времени t , $t_j \leq t \leq t_{j+1}$

Аппроксимация

Запишем основное интегральное тождество

$$I(\varphi, \varphi^*) = \int_0^T \left[\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} + P_i(\varphi) \varphi_i - (D_i(\varphi) + f_i) \right] \varphi_i^* dt = 0, \quad (2)$$

$i = 1, \dots, n$. Где $\varphi^* = (\varphi_1^*, \dots, \varphi_n^*)$ принадлежит сопряженному пространству к пространству функций состояния.

Обозначим $D_i(\varphi) + f_i = F_i(\varphi)$.

Перепишем (2)

$$\int_{t_j}^{t_{j+1}} \left(-\frac{\partial \varphi_i^*}{\partial t} + P_i(\varphi) \varphi_i^* \right) \varphi_i dt = \int_{t_j}^{t_{j+1}} F_i(\varphi) \varphi_i^* dt - [\varphi_i \varphi_i^*]_{t_j}^{t_{j+1}} \quad (3)$$

выбираем $\varphi_i^*(t)$, $t_j \leq t \leq t_{j+1}$ т.ч.

$$\begin{aligned} -\frac{\partial \varphi_i^*}{\partial t} + P_i(\varphi) \varphi_i^* &= 0, \\ \varphi_i^*(t_{j+1}) &= 1. \end{aligned} \quad (4)$$

$$\text{В итоге получаем } \varphi_i^*(t) = e^{-P_i(t_{j+1}-t)}. \quad (5)$$

Аппроксимация

$$\text{Из (3) } \varphi_i^{j+1} = \varphi_i^j e^{-P_i \Delta t} + \int_0^{\Delta t} F_i(\varphi) e^{-P_i(\Delta t - \tau)} d\tau, \quad (6)$$

$$\text{где } \Delta t = t_{j+1} - t_j.$$

Аппроксимируем интеграл со вторым порядком и получаем [1]:

$$\varphi_i^{j+1} = \varphi_i^j e^{-P_i \Delta t} + \frac{1 - e^{-\frac{P_i \Delta t}{2}}}{\frac{P_i \Delta t}{2}} \times \left(\frac{f_{1i} e^{-\frac{P_i \Delta t}{2}} + f_{2i}}{2} \right) \Delta t, \quad (7)$$

$$\text{где } f_{1i} = F_i(\varphi^j, t_j), \quad f_{2i} = F_i(\psi^{j+1}, t_j + \Delta t),$$

$$\psi^{j+1} = \varphi_i^j e^{-P_i \Delta t} + \frac{1 - e^{-P_i \Delta t}}{P_i \Delta t} f_{1i} \Delta t.$$

[1]. В.В.Пененко. Методы численного моделирования атмосферных процессов. – Ленинград: Гидрометеоиздат, 1981.

Тестовая задача

Приведенная выше численная схема будет рассматриваться на примере [2].

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = -1000c_1, \quad c_1(0) = 1. \quad (8)$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = 0,999c_1 - c_2, \quad c_2(0) = 0,999$$

Аналитическое решение

$$c_1(t) = e^{-1000t}$$
$$c_2(t) = -0,001e^{-1000t} + e^{-t}$$

В обозначениях схемы $\varphi = (c_1, c_2)^T, P_1 = 1000, P_2 = 1$.

[2].Х. Розенброк, С. Стори Вычислительные методы для инженеров химиков. «Мир», Москва 1968

Исследование свойств схемы

Для нашей системы схема примет вид

$$c_1^{j+1} = c_1^j e^{-1000\Delta t}, \text{ где } f_{1_1} = 0, f_{2_1} = 0 \quad (9)$$

$$c_2^{j+1} = c_2^j e^{-\Delta t} + \frac{1-e^{-\Delta t/2}}{\Delta t} [f_{1_2} e^{-\Delta t/2} + f_{2_2}] \Delta t, \text{ где}$$

$$f_{1_2} = 0,999c_1^j, \quad f_{2_2} = 0,999c_1^j e^{-1000\Delta t}$$

Раскладывая e^x в р. Тейлора

$$c_1^{j+1} = c_1^j - 1000c_1^j \Delta t + O(\Delta t^2),$$

$$c_2^{j+1} = c_2^j - c_2^j \Delta t + 0,999c_1^j \Delta t + O(\Delta t^2) + \\ + \frac{1}{2} \left[\frac{\Delta t^2}{2} 0,999c_1^j + O(\Delta t^2) - 999c_1^j \Delta t^2 \right],$$

Исследование свойств схемы

Запишем систему разностных уравнений, аппроксимирующих систему (8) на j -ом шаге по времени

$$\begin{aligned}c_1^{j+1} &= c_1^j - 1000c_1^j\Delta t \\c_2^{j+1} &= c_2^j + 0.999c_1^j\Delta t - c_2^j\Delta t\end{aligned}\quad (10)$$

Найдем соответствующие невязки

$$\begin{aligned}\delta_1 &= O(\Delta t^2), \\ \delta_2 &= O(\Delta t^2) + \frac{1}{2} \left[\frac{\Delta t^2}{2} 0,999c_1^j + O(\Delta t^2) - \right. \\ &\quad \left. -999c_1^j\Delta t^2 \right]\end{aligned}\quad (11)$$

Получили что 2 невязки имеют второй порядок.

Исследование свойств схемы

Следуя методам, изложенным в [3] исследуем устойчивость схемы.

$$\varphi_i^{j+1} = \varphi_i^j R_i(\Delta t) + \omega_i^j \Delta t, \quad \text{где}$$

$$\text{Где } R_i(\Delta t) = e^{-P_i \Delta t},$$

$$\omega_i^j = \frac{1 - e^{-\frac{P_i \Delta t}{2}}}{\frac{P_i \Delta t}{2}} \times \frac{f_1 e^{-\frac{P_i \Delta t}{2}} + f_2}{2},$$

Поскольку функции $R_i(\Delta t)$ ограничены нулем снизу и сверху единицей, то

$$\begin{aligned} |\varphi_i^{j+1}| &\leq \max_i \varphi_i^j + \Delta t \max_{i,j} \omega_i^j, \\ \max_i |\varphi_i^{j+1}| &\leq \max_i \varphi_i^0 + (K + 1) \Delta t \max_{i,j} \omega_i^j \end{aligned}$$

При ограниченных ω_i^j отсюда следует

[3] Годунов С.К., Рябенский В.С.. Разностные схемы. Наука, 1973.

Исследование свойств схемы

$$\max_i |\varphi_i^{j+1}| \leq \max_i \varphi_i^0 + T \max_{i,j} |\omega_i^j| \leq [1 + T] \|f^h\|_{F^h},$$

где f^h - функция, ограничивающая сверху функции ω_i^j и φ_i^0 , где

$$\|f^h\|_{F^h} = \max_j |f^j| \text{-норма в пространстве непрерывных функций}$$

Доказанное неравенство имеет место для всех j , поэтому можем записать

$$\|\varphi^{(h)}\|_{U^h} \leq [1 + T] \|f^h\|_{F^h}, \text{ где } \|\varphi^{(h)}\|_{U^h} = \max_{i,j} |\varphi_i^{j+1}|.$$

Что, в свою очередь означает устойчивость схемы.

- Анализируя схему (9) получаем, что она является положительной за счет положительности коэффициентов в формулах реализации алгоритма при неотрицательных начальных данных

Свойства схемы

На примере показали, что схема обладает свойствами:

- Аппроксимирует исходную дифференциальную задачу со вторым порядком по времени,
- Устойчивость,
- Монотонность;

Численные результаты

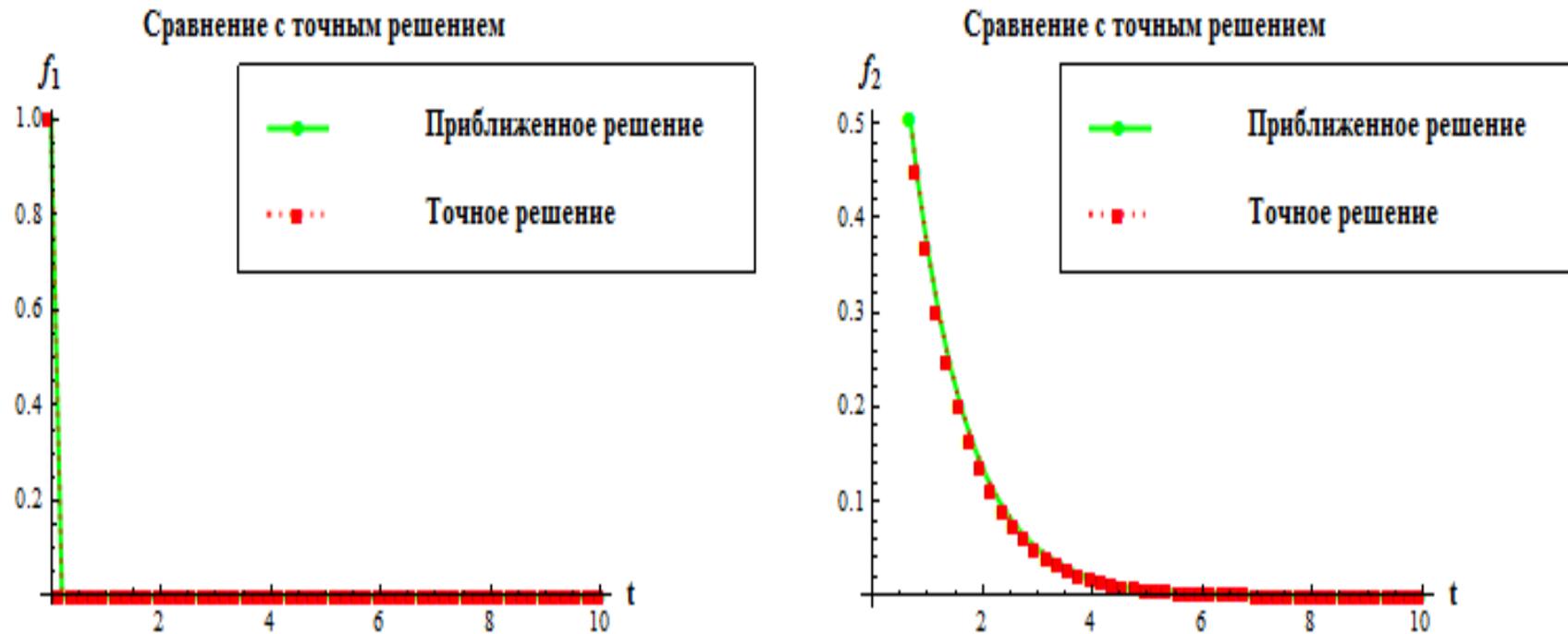


Рис.1 Поведение точного и приближенного решений

Численные результаты

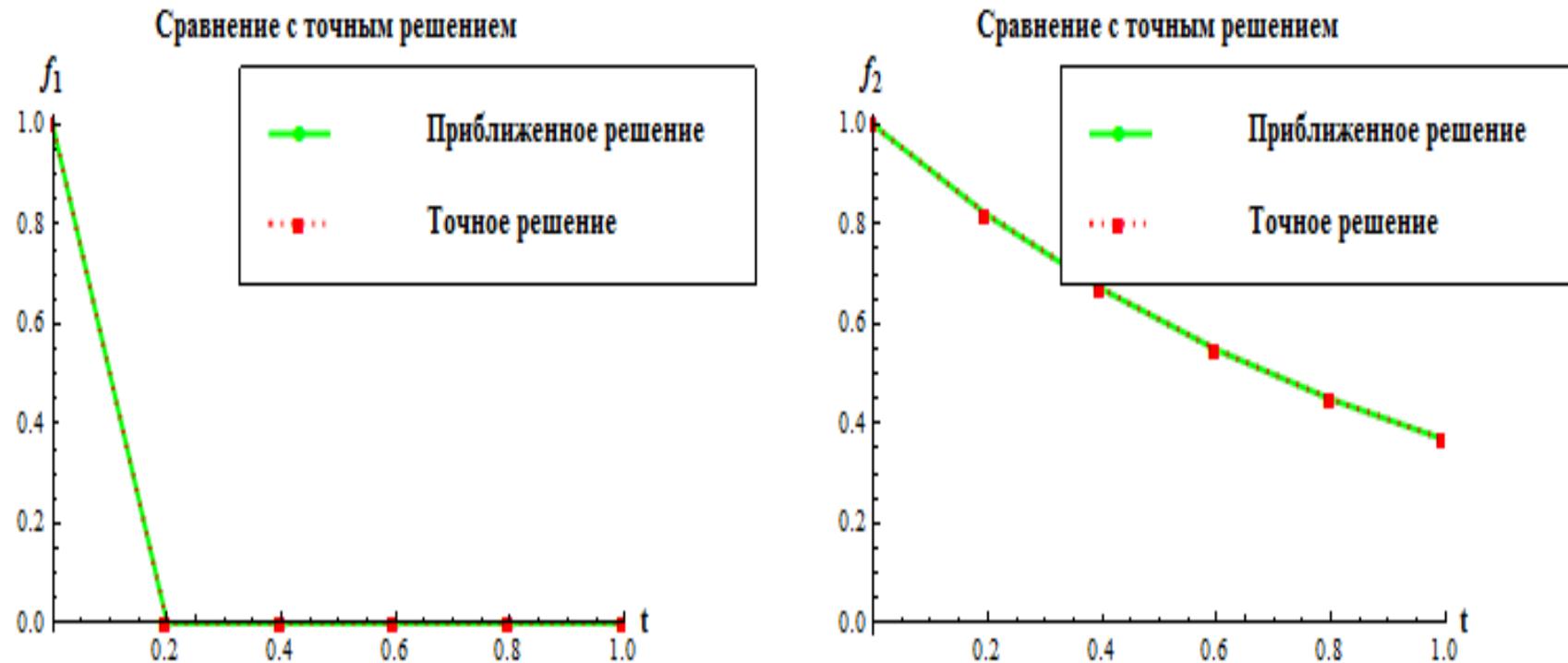


Рис.2 Решение сетке повышенного разрешения

Численные результаты

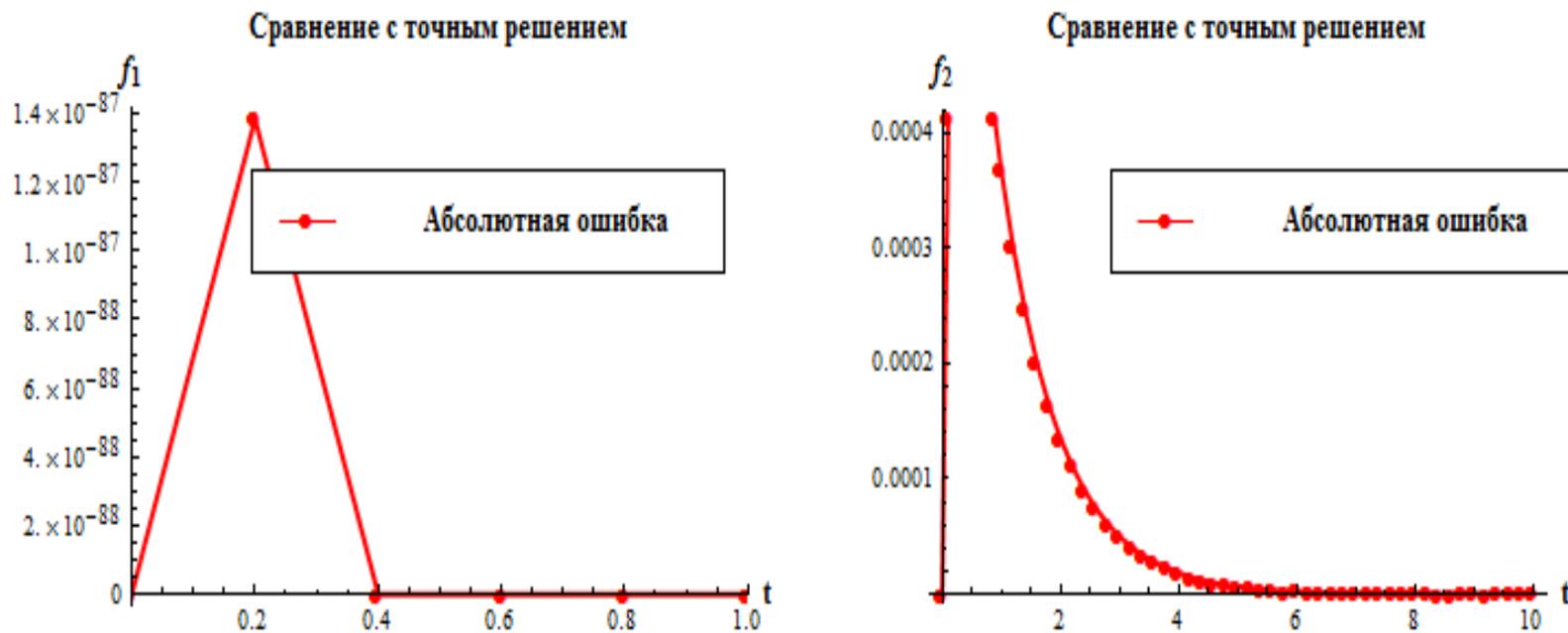


Рис. 3 Абсолютная ошибка

Численные результаты

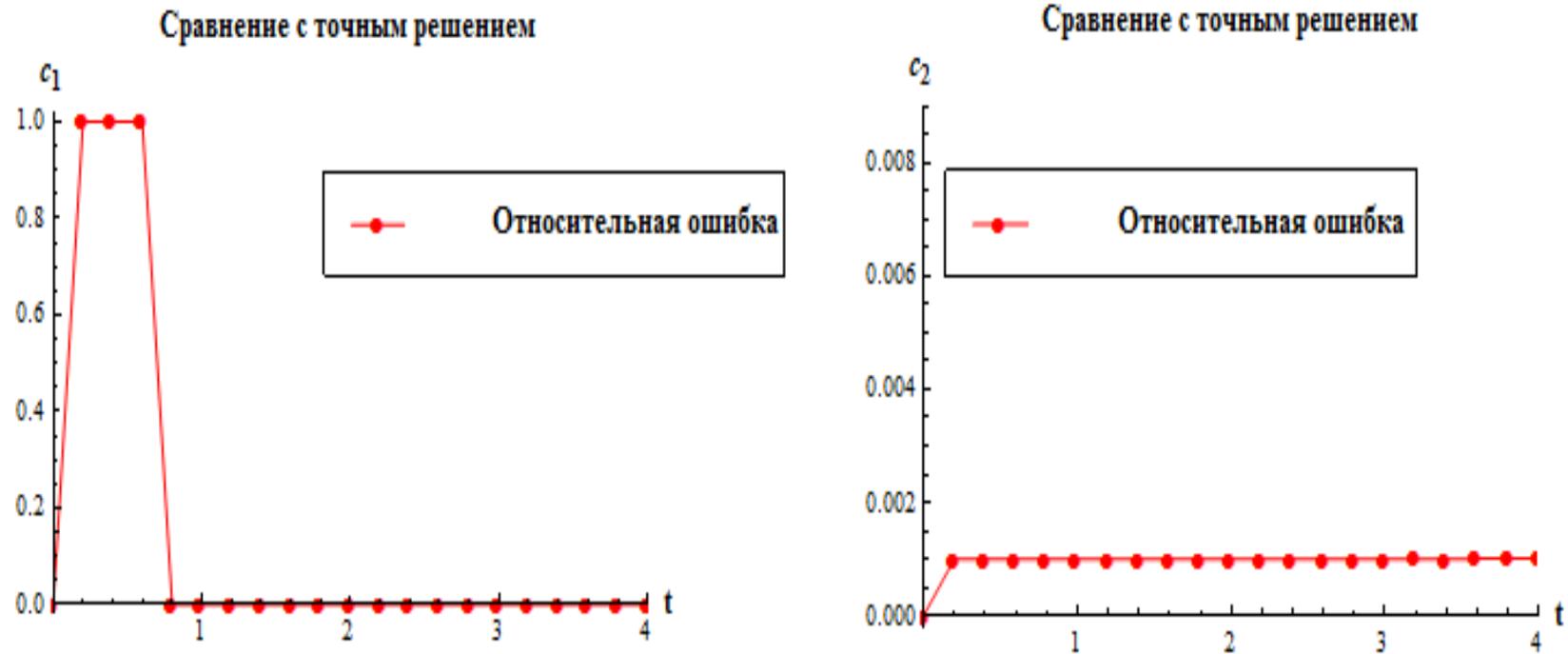


Рис. 3 Относительная ошибка

Заключение

- **Построена монотонная, безусловно положительная явная двухшаговая численная схема, которая была проверена на модельной задаче (пример жесткой системы дифференциальных уравнений).**
- **Очевидными плюсами построенной схемы является возможность использовать более крупные шаги по времени и положительность, обеспеченная использованием экспоненциальных функций.**

Спасибо за внимание!