УДК 504.06:303.732.4:512.643:519.612

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ВРЕДНЫХ ПРИМЕСЕЙ В АТМОСФЕРЕ

В.В. ЗАВОДНИК

Проведен анализ процессов распространения вредных примесей в атмосфере. Предложен модифицированный алгоритм решения системы линейных уравнений большой размерности с разреженной матрицей коэффициентов, полученной на основе использования схемы упорядочения узлов дискретной сетки D4, значительно упрощающей процедуру решения численного аналога редуцированных моделей этих процессов, описанных дифференциальными уравнениями в частных производных параболического типа.

Сокращение вредных выбросов химической, металлургической, нефтеперерабатывающей, газовой и других отраслей производства — одна из важнейших проблем цивилизации, практическая необходимость решения которой обоснована в Киотском протоколе.

Масштабность распространения и многофакторность воздействия выбросов на биосферу, ноосферу и климат Земли определяют необходимость системного исследования многих глобальных процессов. Среди них особое место занимают процессы загрязнения окружающей среды как основы жизни и деятельности населения планеты. Системные исследования воздействия вредных выбросов на качество окружающей среды и экологическую обстановку выполняют во многих странах как в масштабе отдельной страны, так и в мировом масштабе в соответствии с решениями ООН [1,2]

Цель настоящей работы — предложить новый подход к исследованию процессов распространения вредных выбросов в виде примесей в атмосферу.

Исходной информацией для исследования задаются типовые данные системы атмосферного мониторинга и прогнозирования состояния воздушного бассейна, на основе которых создаются математические модели распространения вредных примесей в атмосфере, описываемые детерминированными дифференциальными уравнениями в частных производных параболического типа, отражающими процессы диффузии, переноса, диссипации и фотохимических реакций. Одним из главных элементов анализа является формирование дискретного аналога модели, полученного в результате ее редукции и представленного матричным уравнением состояния. При решении реальных задач отличительная черта аналога — это большой порядок рассматриваемых векторно-матричных соотношений, обусловленный 3-мерной сеткой дискретизации по пространственным координатам и значительной разреженностью матрицы коэффициентов (количество нулевых элементов составляет не более 0,3% общего числа). Поэтому применение типовых подходов к таким задачам без учета структуры матрицы коэффициентов приводит к неприемлемым с практической точки зрения затратам оперативной памяти вычислительной системы. Предлагаемый подход основан на методе реализации матричного уравнения, который базируется на модифицированном алгоритме его решения с применением схемы упорядочения неизвестных с чередующимися диагональными плоскостями, впервые предложенной Прайсом и Коатсом [3]. Это позволяет повысить быстродействие вычислительной системы обработки исходной информации о состоянии воздушного бассейна.

Перейдем к математической формализации уравнений и разработке алгоритма их решения. Процесс распространения вредных газообразных примесей в атмосфере будем рассматривать в 3-мерной области Ω с боковой поверхностью $\partial\Omega$ и поверхностями нижнего и верхнего основания соответственно $\partial\Omega_{\text{н}}$ ($z_3 = 0$) и $\partial\Omega_{\text{в}}$ ($z_3 = h$), динамику процесса опишем дифференциальным уравнением в частных производных вида [4] с соответствующими граничными и начальными условиями.

$$\frac{\partial q(t,\mathbf{z})}{\partial t} + (\mathbf{u}, \operatorname{grad} q(t,\mathbf{z})) - \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial z_i}\left(\mu_{z_i}(t)\frac{q(t,\mathbf{z})}{\partial z_i}\right) + \sigma q(t,\mathbf{z}) = f(t,\mathbf{z}). \qquad (1)$$

Начальные и граничные условия имеют вид

$$\left.\frac{\partial q(t,\mathbf{z})}{\partial \mathbf{n}}\right|_{\mathbf{z}\in\partial\Omega_{\text{в}}} = 0, \quad (\mathbf{u},\mathbf{n}) > 0, \quad q(t,\mathbf{z}) = 0, \ \mathbf{z}\in\partial\Omega_{\text{в}}, \quad (\mathbf{u},\mathbf{n}) < 0,$$

$$\left.\frac{\partial q(t,\mathbf{z})}{\partial z_3}\right|_{z_3=0} = \alpha_{\text{B}} q(t,0), \quad q(t,h) = 0, \qquad (2)$$

$$\frac{\partial q(t,\mathbf{z})}{\partial \mathbf{n}} = \lambda(q_{\text{вне}} - q_{\text{на}}) \text{ на боковой границе } \partial\Omega,$$

$$q(t,\mathbf{z}) = q_0(\mathbf{z}), \quad t = 0. \qquad (3)$$

Функция источников (типа «заводская труба») описана следующим образом:

$$f(t,\mathbf{z}) = \sum_{i=1}^{m} U_i(t)\,\delta(\mathbf{z} - \mathbf{z}^i),$$

где $q(t,\mathbf{z})$ — концентрация вредного ингредиента в точке пространства; $\mathbf{z} = (x,y,z)\in\Omega$; $\mathbf{u} = (u,\upsilon,\omega)$ — вектор скорости ветра, подчиняющийся условию неразрывности; μ — коэффициент турбулентной диффузии; σ — коэффициент поглощения примеси; m — общее количество источников загрязнения со своими координатами; α_{B} — коэффициент взаимодействия с подстилающей поверхностью; $U_i(t)$ — интенсивность выбросов i-го источника (по количеству ингредиента), расположенного в точке $\mathbf{z}^i$; $\mathbf{n}$ — нормаль к границе слоя; $q_{\text{вне}}$ и $q_{\text{на}}$ — концентрации ингредиента соответственно за границей слоя и на его границе; $\delta(\mathbf{z},\mathbf{z}^i)$ — дельта-функция Дирака, определяющая точку расположения источника.

Редуцировав модель, описанную уравнениями (1)–(3), применяя метод конечных разностей второго порядка по 7-точечному шаблону (рис. 1) и схему Кранка-Николсона [5], получаем конечномерную численную модель исходного аналога.

$$AX_{n-1,p,k} + BX_{n,p,k} + CX_{n+1,p,k} + DX_{n,p-1,k} + EX_{n,p+1,k} +$$

$$+ GX_{n,p,k-1} + HX_{n,p,k+1} = F_{n,p,k}\,. \tag{4}$$

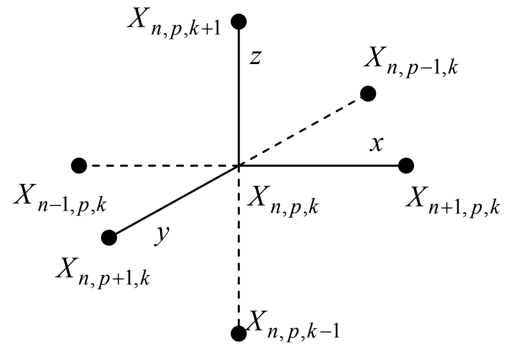

Рис. 1. Схема 7- точечного шаблона дискретизации

Уравнение (4) для всех $\mathbf{X}$ можно привести к матричному виду

$$\mathbf{A}\,\mathbf{X} = \mathbf{B}\,. \tag{5}$$

Одним из наиболее эффективных методов реализации матричных моделей (5) распределенных процессов (1)–(3) является схема упорядочения узлов сетки дискретизации D4 [6]. Это прямой метод решения систем линейных уравнений большой размерности. Его отличительная черта — специальный порядок нумерации узлов дискретизации, что приводит к преобразованию матричной модели (5) в блочную структуру. Блочная система линейных уравнений поддается упрощению, после чего может быть решена независимо для нижней и верхней частей. Последнее обстоятельство обусловливает значительную эффективность метода.

Сформулируем матричное уравнение состояния (5) на основе схемы упорядочения D4 к конечномерной модели рассматриваемых процессов (1)–(3).

Для схемы D4 наблюдается зависимость номера узла l сетки дискретизации от текущих значений ее координат n, p и k (см. таблицу)

$$l = f_{d4}(n,p,k)\,.$$

В таблице

$$V = \frac{NPK}{2}\,,\;\; m1 = \frac{(m-k-1)(m-k-2)}{2} + p\,,$$

$$f2(x) = \frac{x(x+1)(4x+5)}{6}\,,\;\; f1(x) = \frac{x(x+1)(4x-1)}{6}\,,$$

$$l1(x,y,z)=\begin{cases}0, & \mathrm{z}>\mathrm{x}-\mathrm{y}-2,\\ \dfrac{\mathrm{x}-\mathrm{y}-\mathrm{z}-1}{2}(x-y-z-2), & \mathrm{z}\le \mathrm{x}-\mathrm{y}-2,\end{cases}$$

Соотношения для расчета номера узла $l=f_{d4}(n,p,k)$ в схеме D4 по текущим значениям координат $m=n+p+k$, n, p и k

m — четное		m — нечетное	
$m\le K+2$	$V+f2(M)+m1$	$m\le K+1$	$f1(L)+m1$
$K+2<m\le$ $\le N+2$	$V+f2(M)+m1-$ $-f2(M1)$	$K+1<m\le$ $\le N+1$	$f1(L)+m1-f1(L1)$
$N+2<m\le$ $\le P+2$	$V+f2(M)+m1-$ $-f2(M1)-f2(M2)-$ $-l1(m,N,k)$	$N+1<m\le$ $\le P+1$	$f1(L)+m1-f1(L1)-$ $-f1(L2)-l1(m,N,k)$
$P+2<m\le$ $\le K+N+3$	$V+f2(M)+m1-$ $-f2(M1)-f2(M2)-$ $-l1(m,N,k)-f2(M3)-$ $-l2(m,P,k)$	$P+1<m\le$ $\le K+N+2$	$f1(L)+m1-f1(L1)-$ $-f1(L2)-l1(m,N,k)-$ $-f1(L3)-l2(m,P,k)$
$K+N+3<m\le$ $\le K+P+3$	$V+f2(M)+m1-$ $-f2(M1)-f2(M2)-$ $-l1(m,N,k)-f2(M3)-$ $-l2(m,P,k)+f2(M4)+$ $+i1$	$K+N+2<m\le$ $\le K+P+2$	$f1(L)+m1-f1(L1)-$ $-f1(L2)-l1(m,N,k)-$ $-f1(L3)-l2(m,P,k)+$ $+f1(L4)+i1$
$K+P+3<m\le$ $\le N+P+3$	$V+f2(M)+m1-$ $-f2(M1)-f2(M2)-$ $-l1(m,N,k)-f2(M3)-$ $-l2(m,P,k)+f2(M4)+$ $+i1+f2(M5)+i2$	$K+P+2<m\le$ $\le N+P+2$	$f1(L)+m1-f1(L1)-$ $-f1(L2)-l1(m,N,k)-$ $-f1(L3)-l2(m,P,k)+$ $+f1(L4)+i1+$ $+f1(L5)+i2$
$m>N+P+3$	$V+f2(M)+m1-$ $-f2(M1)-f2(M2)-$ $-l1(m,N,k)-f2(M3)-$ $-l2(m,P,k)+f2(M4)+$ $+i1+f2(M5)+$ $+i2+f2(M6)$	$m>N+P+2$	$f1(L)+m1-f1(L1)-$ $-f1(L2)-l1(m,N,k)-$ $-f1(L3)-l2(m,P,k)+$ $+f1(L4)+i1+$ $+f1(L5)+i2+$ $+f1(L6)$

$$i1 = \frac{(m-N-K-1)(m-N-K-2)}{2},$$

$$l2(x,y,z) = \begin{cases} 0, & \mathrm{z} > \mathrm{x}-\mathrm{y}-2, \\ \dfrac{\mathrm{x}-\mathrm{y}-\mathrm{z}}{2}(x-y-z-1), & \mathrm{z} \le \mathrm{x}-\mathrm{y}-2, \end{cases}$$

$$i2 = \frac{(m-P-K-1)(m-P-K-2)}{2},$$

$$L = \frac{m-3}{2},\ \ L1 = \frac{m-K-1}{2},\ \ L2 = \frac{m-N-3}{2},\ \ L3 = \frac{m-P-3}{2},$$

$$L4 = \frac{m-N-K-3}{2},\ \ L5 = \frac{m-P-K-3}{2},\ \ L6 = \frac{m-N-P-3}{2},$$

$$M = \frac{m-4}{2},\ \ M1 = \frac{m-K-2}{2},\ \ M2 = \frac{m-N-4}{2},$$

$$M3 = \frac{m-P-4}{2},\ \ M4 = \frac{m-N-K-4}{2},$$

$$M5 = \frac{m-P-K-4}{2},\ \ M6 = \frac{m-N-P-4}{2}.$$

Рассчитав на основании соотношений, приведенных в таблице, номера узлов l для всех $n = 1, N$; $p = 1, P$ и $k = 1, K$, заполним ими 3-мерный массив с номерами узлов сетки дискретизации. Таким образом, для определения номера узла l, имеющего координаты n, p и k, необходимо осуществить операцию выборки элемента 3-мерного массива по координатам $l = f_{d4}(n,p,k)$ (рис. 2).

Записав уравнение (1) для всех $n = 1, N$; $p = 1, P$ и $k = 1, K$ и упорядочив неизвестные $x_{n-1,p,k}$; $x_{n+1,p,k}$; $x_{n,p,k}$; $x_{n,p-1,k}$; $x_{n,p+1,k}$; $x_{n,p,k-1}$; $x_{n,p,k+1}$ по схеме D4, получаем матричное уравнение (5). Матрица коэффициентов $\mathbf{A}$ этого уравнения имеет блочную структуру, поэтому представим (5) в блочном виде

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}_1 \vdots \mathbf{A}_2 \\ \cdots\cdots\cdots \\ \mathbf{A}_3 \vdots \mathbf{A}_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{X}_1 \\ \cdots\cdots \\ \mathbf{X}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_1 \\ \cdots\cdots \\ \mathbf{B}_2 \end{bmatrix}. \tag{6}$$

Детализируем структуру матриц $\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \mathbf{A}_3, \mathbf{A}_4$ и вектор-столбцов $\mathbf{B}_1$ и $\mathbf{B}_2$, размерность которых соответственно равна $NPK/2 \times NPK/2$ и $1 \times NPK/2$.

Матрица $\mathbf{A}_2$ — 6-диагональная ленточного типа (рис. 3) — однозначно определена при задании совокупности выражений для расчета ее элементов и их индексов i (по вертикальному направлению) и j (горизонтальному).

На каждой строке i матрицы $\mathbf{A}_2$ расположены ее элементы D_{ij_D}, A_{ij_A}, C_{ij_C}, E_{ij_E}, G_{ij_G}, H_{ij_H}. Эти элементы определены в процедуре дискретизации уравнений (1)−(3) и содержат результат арифметических операций над их коэффициентами. Индексы j_D, j_A, j_C, j_E, j_G, j_H этих элементов матрицы $\mathbf{A}_2$ зависят от n, p и k.

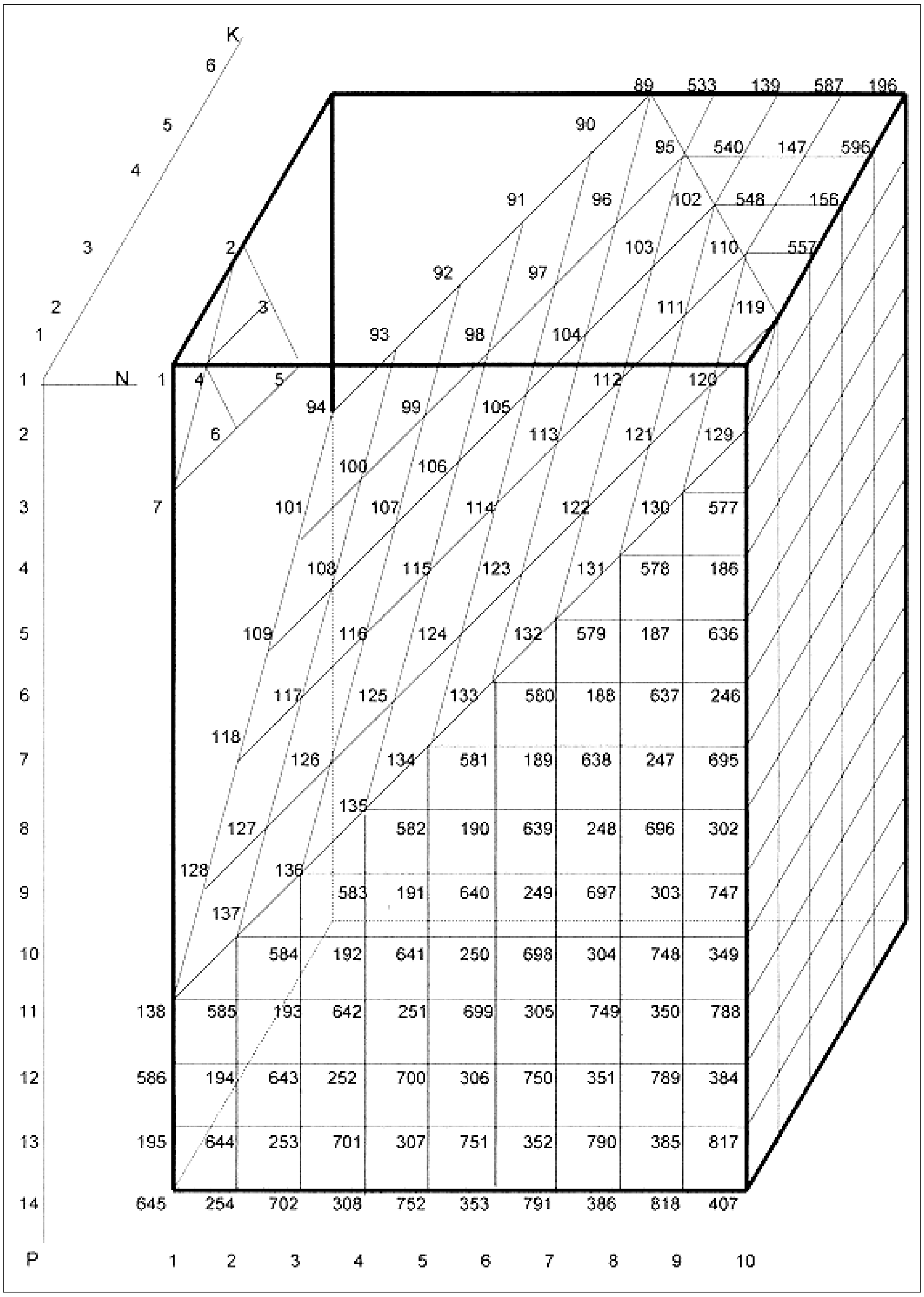

Рис. 2. Схема нумерации узлов дискретной сетки по схеме D4 ($K = 6$, $N = 10$, $P = 14$)

Аналогично определяется матрица $\mathbf{A}_3$.

Матрицы $\mathbf{A}_1$ и $\mathbf{A}_4$ — диагональные. Их элементы B_{ij} определены так же, как и элементы D_{ij_D}, A_{ij_A}, C_{ij_C}, E_{ij_E}, G_{ij_G}, H_{ij_H}. Векторы-столбцы $\mathbf{B}_1$ и $\mathbf{B}_2$ являются подвекторами вектора-столбца $\mathbf{B}$.

В результате применения схемы упорядочения к сеточному уравнению (1) получено матричное уравнение (5), имеющее блочную структуру (6). Для его решения применим подход, предложенный в работе [6] для решения систем линейных уравнений блочного вида.

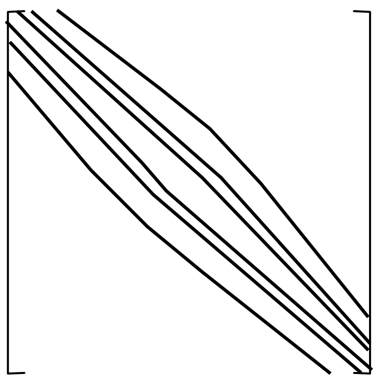

Рис.3. Схема структуры матриц коэффициентов $\mathbf{A_2}$ и $\mathbf{A_3}$

Решим уравнение (6). Учитывая его блочную структуру, представим вектор решений в виде совокупности подвекторов.

Процедура расчета на основе стандартной схемы [6]:

1. Вектор неизвестных определяем в два этапа.

1.1. Производим исключение неизвестных на нижней половине уравнения (6), после чего оно принимает вид

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}_1 \vdots \mathbf{A}_2 \\ \cdots\cdots\cdots \\ 0 \ \vdots \mathbf{A}_4' \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \mathbf{X}_1 \\ \cdots\cdots \\ \mathbf{X}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_1 \\ \cdots\cdots \\ \mathbf{F}' \end{bmatrix}. \qquad (7)$$

1.2. Решаем систему линейных уравнений

$$\mathbf{A}_4' * \mathbf{X}_2 = \mathbf{F}'. \qquad (8)$$

2. Определяем вектор $\mathbf{X}_1$, решив матричное уравнение

$$\mathbf{X}_1 = \mathbf{A}_1^{-1} * \mathbf{B}_1 - \mathbf{A}_1^{-1} * \mathbf{A}_2 * \mathbf{X}_2. \qquad (9)$$

3. Ищем вектор $\mathbf{X}$ в виде совокупности векторов $\mathbf{X}_1$ и $\mathbf{X}_2$.

Для выполнения рассмотренного алгоритма применяется:

- процедура исключения Гаусса на нижней половине матричного уравнения (6), которая заключается в определении матрицы $\mathbf{A}_4'$ и вектора $\mathbf{F}'$;
- эффективные алгоритмы [7], учитывающие переменную длину ленты $\mathbf{A}_4'$ для решения системы линейных уравнений ленточного типа (8);
- процедура решения матричного уравнения (8), реализуемая таким образом, чтобы исключить затраты памяти на хранение нулевых элементов матриц и действий с ними.

Порядок определения и хранения ненулевых элементов разреженной матрицы и вектора-столбца приведены в (10), (13), (14).

Анализ схемы упорядочения с точки зрения запросов не только основной, но и дополнительной памяти вычислительной системы показал, что на долю последней приходится значительная часть общей памяти. Поэтому модификация данной схемы, направленная на сокращение затрат дополнительной памяти, является актуальной задачей [7, 8].

Разработка модифицированного варианта алгоритма решения системы алгебраических линейных уравнений (6) с использованием схемы упорядочения D4

Произведем модификацию алгоритма решения СЛАУ на основе схемы упорядочения D4 с целью сокращения запросов памяти вычислительной системы на ее реализацию за счет снижения затрат дополнительной памяти, необходимой для расчета и хранения элементов матрицы и вектора-столбца (7). Для 2-мерной задачи модифицированный алгоритм приведен в работах [9, 10]. Для задачи в 3-мерной постановке разработаем процедуру расчета и запоминания координат ненулевых элементов матрицы и вектора, которая требовала бы меньших затрат памяти вычислительной системы по сравнению с аналогичной при стандартной схеме.

Сформулируем свойство размещения ненулевых элементов разреженной матрицы схемы упорядочения: в каждой строке ненулевые элементы расположены в позициях, номера которых определены в массиве номеров узлов сетки дискретизации $\zeta(n,p,k)$.

$$
\begin{gathered}
j_{Q1} = \zeta(n, p+2, k), \quad \forall 1 \le n \le N,\ 1 \le p \le P-2,\ 1 \le k \le K, \\
j_{Q2} = \zeta(n, p+1, k+1), \quad \forall 1 \le n \le N,\ 1 \le p \le P-1,\ 1 \le k \le K-1, \\
j_{Q3} = \zeta(n+1, p+1, k), \quad \forall 1 \le n \le N-1,\ 1 \le p \le P-1,\ 1 \le k \le K, \\
j_{L1} = \zeta(n-1, p+1, k), \quad \forall 2 \le n \le N,\ 1 \le p \le P-1,\ 1 \le k \le K, \\
j_{L2} = \zeta(n, p+1, k-1), \quad \forall 1 \le n \le N,\ 1 \le p \le P-1,\ 2 \le k \le K, \\
j_{R1} = \zeta(n-2, p, k), \quad \forall\ 3 \le n \le N,\ 1 \le p \le P,\ 1 \le k \le K, \\
j_{R2} = \zeta(n-1, p, k-1), \quad \forall\ 2 \le n \le N,\ 1 \le p \le P,\ 2 \le k \le K, \\
j_{R3} = \zeta(n, p, k-2), \quad \forall 1 \le n \le N,\ 1 \le p \le P,\ 3 \le k \le K, \\
j_{L3} = \zeta(n-1, p, k+1), \quad \forall 2 \le n \le N, 1 \le p \le P, 1 \le k \le K-1, \\
j_{I} = \zeta(n, p, k), \quad \forall 1 \le n \le N,\ 1 \le p \le P,\ 1 \le k \le K, \\
j_{L4} = \zeta(n+1, p, k-1), \quad \forall 1 \le n \le N-1,\ 1 \le p \le P,\ 2 \le k \le K, \\
j_{Q4} = \zeta(n, p, k+2), \quad \forall 1 \le n \le N,\ 1 \le p \le P,\ 1 \le k \le K-2, \\
j_{Q5} = \zeta(n+1, p, k+1), \quad \forall 1 \le n \le N-1,\ 1 \le p \le P,\ 1 \le k \le K-1, \qquad (10) \\
j_{Q6} = \zeta(n+2, p, k), \quad \forall 1 \le n \le N-2,\ 1 \le p \le P,\ 1 \le k \le K, \\
j_{R4} = \zeta(n-1, p-1, k), \quad \forall\ 2 \le n \le N,\ 2 \le p \le P,\ 1 \le k \le K, \\
j_{R5} = \zeta(n, p-1, k-1), \quad \forall 1 \le n \le N,\ 2 \le p \le P,\ 2 \le k \le K,
\end{gathered}
$$

$$j_{L5} = \zeta(n, p-1, k+1), \quad \forall 1 \le n \le N, \ 2 \le p \le P, \ 1 \le k \le K-1,$$

$$j_{L6} = \zeta(n+1, p-1, k), \quad \forall 1 \le n \le N-1, \ 2 \le p \le P, \ 1 \le k \le K,$$

$$j_{R6} = \zeta(n, p-2, k), \quad \forall 1 \le n \le N, \ 3 \le p \le P, \ 1 \le k \le K.$$

Сформулированное свойство имеет следующую геометрическую интерпретацию. Если на сетке дискретизации, узлы которой упорядочены по схеме D_4, выбрать узел, где номер строки матрицы образовался в результате процедуры исключения Гаусса на нижней половине системы (6), то для каждой строки номера позиций ненулевых элементов j_{R1}, j_{R2}, j_{R3}, j_{R4}, j_{R5}, j_{R6}, j_I, j_{L1}, j_{L2}, j_{L3}, j_{L4}, j_{L5}, j_{L6}, j_{Q1}, j_{Q2}, j_{Q3}, j_{Q4}, j_{Q5}, j_{Q6} совпадают с номерами узлов сетки дискретизации, находящимися в вершинах на гранях и в точке пересечения диагоналей 8-гранника, вершины которого находятся в узлах сетки дискретизации с индексами

$$\begin{aligned} R6 &= \zeta(n, p-2, k), \quad Q1 = \zeta(n, p+2, k), \\ R1 &= \zeta(n-2, p, k), \quad Q6 = \zeta(n+2, p, k), \\ R3 &= \zeta(n, p, k-2), \quad Q4 = \zeta(n, p, k+2). \end{aligned} \tag{11}$$

Пример (рис. 4). Восстановить номера позиций ненулевых элементов разреженной матрицы, расположенных в i-й строке ($i = 620$). Опишем вокруг узла с номером $1 = i = 620$ 8-гранник. Вершины его опираются на узлы сетки дискретизации, номера которых заданы соотношениями (11). Тогда номера индексов ненулевых элементов j_{R1}, j_{R2}, j_{R3}, j_{R4}, j_{R5} j_{R6}, j_I, j_{L1}, j_{L2}, j_{L3}, j_{L4}, j_{L5}, j_{L6}, j_{Q1}, j_{Q2}, j_{Q3}, j_{Q4}, j_{Q5}, j_{Q6}, расположенных в строке $i = 620$ разреженной матрицы, равны номерам узлов сетки дискретизации, помеченных $R1, R2, R3, R4, R5, R6$, I, $L1, L2, L3, L4$, $L5, L6$, $Q1, Q2$, $Q3, Q4, Q5, Q6$ (см. соотношения (10)).

Из изложенного выше следует, что для запоминания информации об индексах ненулевых элементов разреженной матрицы достаточно хранить массив целых чисел с номерами узлов сетки дискретизации по схеме D4.

Выполним процедуру исключения Гаусса на нижней половине системы линейных уравнений, представленной в матричной форме вида (6). Тогда для $n = \overline{1, N}$; $h = \overline{1, P}$ и $k = \overline{1, K}$, учитывая

$$\begin{gathered} j_D = i_D = \zeta(n, p-1, k), \ j_A = i_A = \zeta(n-1, p, k), \ j_C = i_C = \zeta(n+1, p, k), \\ j_E = i_E = \zeta(n, p+1, k), \quad j_H = i_H = \zeta(n, p, k+1), \\ j_G = i_G = \zeta(n, p, k-1), \ j_B = i_B = \zeta(n, p, k), \end{gathered} \tag{12}$$

получаем соотношения, определяющие ненулевые элементы матрицы $\mathbf{A}'_4$ (19-диагональной, лукообразной (рис. 5)) и вектора-столбца $\mathbf{F}'$.

$$Q1_{i, j_{R3}} = -E_{i_E} \frac{E_i}{B_i}, \quad \forall 1 \le n \le N, \ 1 \le p \le P-2, \ 1 \le k \le K,$$

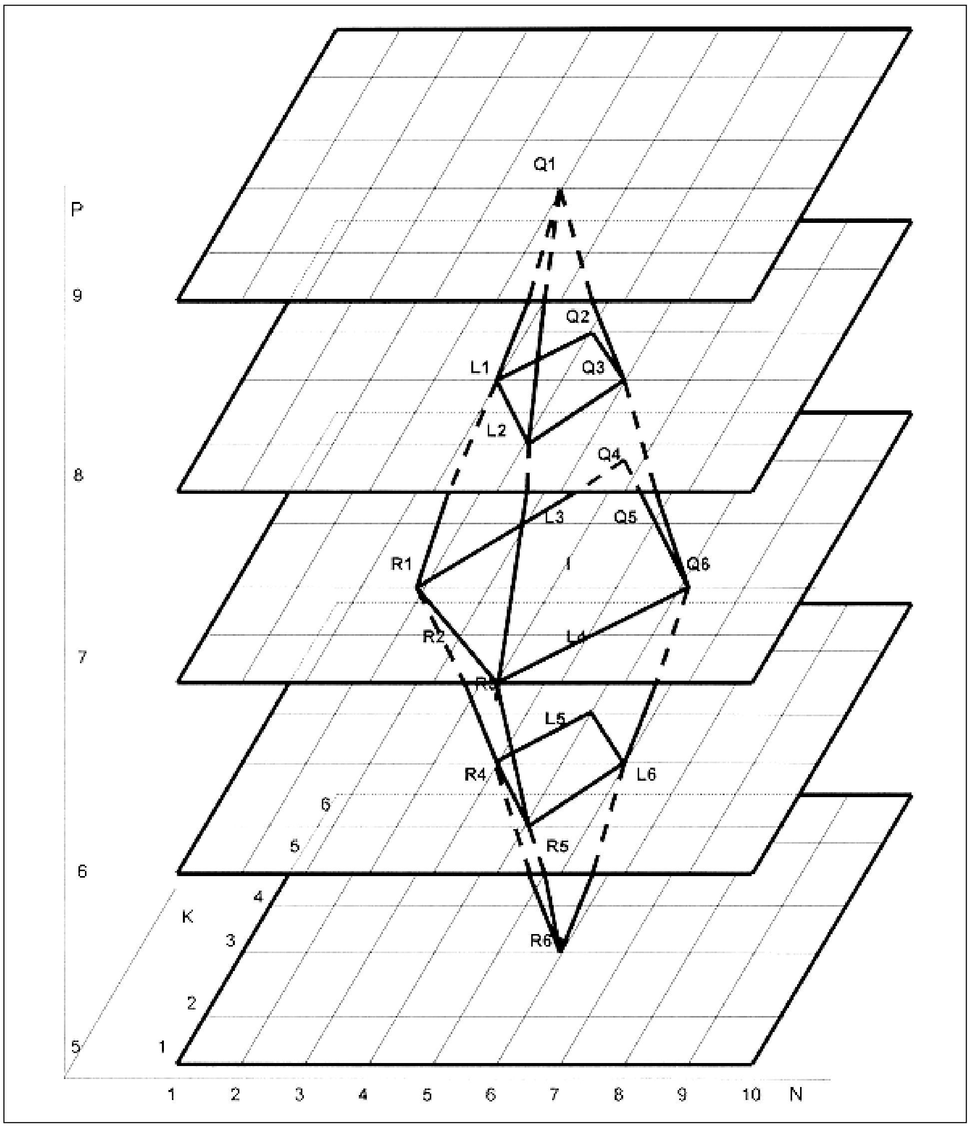

Рис. 4. Схема фрагмента сетки дискретизации

$$Q2_{i,j_{Q2}} = -H_{i_E}\frac{E_i}{B_{i_E}} - E_{i_H}\frac{H_i}{B_{i_H}}, \quad \forall 1 \le n \le N,\ 1 \le p \le P-1,\ 1 \le k \le K-1,$$

$$Q3_{i,j_{Q3}} = -E_{i_C}\frac{C_i}{B_{i_C}} - C_{i_E}\frac{E_i}{B_{i_E}}, \quad \forall 1 \le n \le N-1,\ 1 \le p \le P-1,\ 1 \le k \le K,$$

$$L1_{i,j_{L1}} = -E_{i_A}\frac{A_i}{B_{i_A}} - A_{i_E}\frac{E_i}{B_{i_E}}, \quad \forall 2 \le n \le N,\ 1 \le p \le P-1,\ 1 \le k \le K,$$

$$L2_{i,j_{L2}} = -G_{i_E}\frac{E_i}{B_{i_E}} - E_{i_G}\frac{G_i}{B_{i_G}}, \quad \forall 1 \le n \le N,\ 1 \le p \le P-1,\ 2 \le k \le K,$$

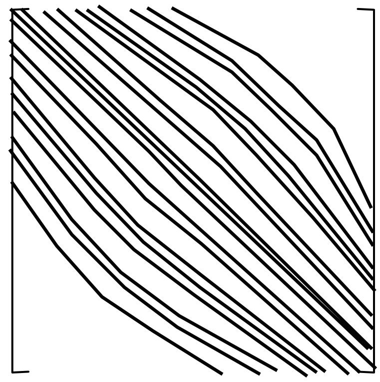

Рис. 5. Схема структуры матриц коэффициентов $\mathbf{A}_4'$

$$R1_{i,j_{R3}} = -A_{i_A}\frac{A_i}{B_{i_A}}, \quad \forall 3 \le n \le N,\ 1 \le p \le P,\ 1 \le k \le K\,,$$

$$R2_{i,j_{R2}} = -G_{i_A}\frac{A_i}{B_{i_A}} - A_{i_G}\frac{G_i}{B_{i_G}}, \quad \forall 2 \le n \le N,\ 1 \le p \le P,\ 2 \le k \le K\,,$$

$$R3_{i,j_{R3}} = -G_{i_G}\frac{G_i}{B_{i_G}}, \quad \forall 1 \le n \le N,\ 1 \le p \le P,\ 3 \le k \le K\,,$$

$$L3_{i,j_{L3}} = -H_{i_A}\frac{A_i}{B_{i_A}} - A_{i_H}\frac{H_i}{B_{i_H}}, \quad \forall 2 \le n \le N,\ 1 \le p \le P,\ 1 \le k \le K-1, \quad (13)$$

$$I_{I,j_I} = B_i - E_{i_D}\frac{D_i}{B_{i_D}} - C_{iA}\frac{A_i}{B_{i_A}} - A_{i_C}\frac{C_i}{B_{i_C}} -$$

$$- D_{i_E}\frac{E_i}{B_{i_E}} - H_{i_G}\frac{G_i}{B_{i_G}} - G_{i_H}\frac{H_i}{B_{i_H}},$$

$$\forall 2 \le n \le N-1, 2 \le p \le P-1, 2 \le k \le K-1,$$

$$L4_{i,j_{L4}} = -G_{i_C}\frac{C_i}{B_{i_C}} - C_{i_G}\frac{G_i}{B_{i_G}}, \quad \forall 1 \le n \le N-1,\ 1 \le p \le P,\ 2 \le k \le K\,,$$

$$Q4_{i,j_{R3}} = -H_{i_H}\frac{H_i}{B_{i_H}}, \quad \forall 1 \le n \le N,\ 1 \le p \le P,\ 1 \le k \le K-2\,,$$

$$Q5_{i,j_{Q5}} = -H_{i_C}\frac{C_i}{B_{i_C}} - C_{i_H}\frac{H_i}{B_{i_H}}, \quad \forall 1 \le n \le N-1,\ 1 \le p \le P,\ 1 \le k \le K-1\,,$$

$$Q6_{i,j_{R3}} = -C_{i_C}\frac{C_i}{B_{i_C}}, \quad \forall 1 \le n \le N-2,\ 1 \le p \le P,\ 1 \le k \le K\,,$$

$$R4_{i,j_{R4}} = -A_{i_D}\frac{D_i}{B_{i_D}} - D_{i_A}\frac{A_i}{B_{i_A}}, \quad \forall 2 \le n \le N,\ 2 \le p \le P,\ 1 \le k \le K\,,$$

$$R5_{i,j_{R5}} = -G_{i_D}\frac{D_i}{B_{i_D}} - D_{i_G}\frac{G_i}{B_{i_G}}, \quad \forall 1 \le n \le N,\ 2 \le p \le P,\ 2 \le k \le K,$$

$$L5_{i,j_{L5}} = -H_{i_D}\frac{D_i}{B_{i_D}} - D_{i_H}\frac{H_i}{B_{i_H}}, \quad \forall 1 \le n \le N,\ 2 \le p \le P,\ 1 \le k \le K-1,$$

$$L6_{i,j_{L6}} = -C_{i_D}\frac{D_i}{B_{i_D}} - D_{i_C}\frac{C_i}{B_{i_C}}, \quad \forall 1 \le n \le N-1,\ 2 \le p \le P,\ 1 \le k \le K,$$

$$R6_{i,j_{R6}} = -D_{i_D}\frac{D_i}{B_{i_D}}, \quad \forall 1 \le n \le N,\ 3 \le p \le P,\ 1 \le k \le K,$$

$$F_i' = B_{2i} - B_{1i_D}\frac{D_i}{B_{i_D}} - B_{1i_A}\frac{A_i}{B_{i_A}} - B_{1i_C}\frac{C_i}{B_{i_C}} -,$$

$$- B_{1i_E}\frac{E_i}{B_{i_E}} - B_{1i_G}\frac{G_i}{B_{i_G}} - B_{1i_H}\frac{H_i}{B_{i_H}}$$

$$\forall 2 \le n \le N-1, 2 \le p \le P-1, 2 \le k \le K-1. \qquad (14)$$

В узлах, лежащих на гранях параллелепипеда в формулах (13), (14) отсутствуют слагаемые соответственно для I_{i,j_I} и F_i' (см. рис. 1).

$$E_{i_D}\frac{D_i}{B_{i_D}},\ B_{1i_D}\frac{D_i}{B_{i_D}}, \quad \forall p=1,\ C_{i_A}\frac{A_i}{B_{i_A}},\ B_{1i_A}\frac{A_i}{B_{i_A}}, \quad \forall n=1,$$

$$A_{i_C}\frac{C_i}{B_{i_C}},\ B_{1i_C}\frac{C_i}{B_{i_C}}, \quad \forall n=N,\ D_{i_E}\frac{E_i}{B_{i_E}},\ B_{1i_E}\frac{E_i}{B_{i_E}}, \quad \forall p=P,$$

$$H_{i_G}\frac{G_i}{B_{i_G}},\ B_{1i_G}\frac{G_i}{B_{i_G}}, \quad \forall k=1,\ G_{i_H}\frac{H_i}{B_{i_H}},\ B_{1i_H}\frac{H_i}{B_{i_H}}, \quad \forall k=K,$$

где $R1_{i,j_{R1}}$, $R2_{i,j_{R2}}$, $R3_{i,j_{R3}}$, $R4_{i,j_{R4}}$, $R5_{i,j_{R5}}$, $R6_{i,j_{R6}}$ $I1_{i,j1}$, $L1_{i,j_{L1}}$, $L2_{i,j_{L2}}$ $L3_{i,j_{L3}}$, $L4_{i,j_{L4}}$, $L5_{i,j_{L5}}$, $L6_{i,j_{L6}}$, $Q1_{i,j_{Q1}}$, $Q2_{i,j_{Q2}}$, $Q3_{i,j_{Q3}}$, $Q4_{i,j_{Q4}}$, $Q5_{i,j_{Q5}}$, $Q6_{i,j_{Q6}}$ — ненулевые элементы разреженной матрицы $\mathbf{A}_4'$, расположенные в позициях j_{R1}, j_{R2}, j_{R3}, j_{R4}, j_{R5}, j_{R6}, j_{L1}, j_{L2}, j_{L3}, j_{L4}, j_{L5}, j_{L6}, j_{Q1}, j_{Q2} j_{Q3}, j_{Q4}, j_{Q5}, j_{Q6} (см. соотношения (10)) i-й строки; A_{i_A}, A_{i_B}, A_{i_C}, A_{i_D}, A_{i_E}, A_{i_G}, A_{i_H} B_{i_A}, B_{i_B}, B_{i_C}, B_{i_D}, B_{i_E}, B_{i_G}, B_{i_H}, C_{i_A}, C_{i_B}, C_{i_C}, C_{i_D}, C_{i_E}, C_{i_G}, C_{i_H}, D_{i_A}, D_{i_B}, D_{i_C}, D_{i_D}, D_{i_E}, D_{i_G}, D_{i_H}, E_{i_A}, E_{i_B}, E_{i_C}, E_{i_D}, E_{i_E}, E_{i_G}, E_{i_H}, G_{i_A}, G_{i_B}, G_{i_C}, G_{i_D}, G_{i_E}, G_{i_G}, G_{i_H}, H_{i_A}, H_{i_B}, H_{i_C}, H_{i_D}, H_{i_E}, H_{i_G}, H_{i_H} — ненулевые элементы исходной разреженной матрицы коэффициентов $\mathbf{A}$ (13) векторов-столбцов коэффициентов $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \mathbf{D}, \mathbf{E}, \mathbf{G}, \mathbf{H}$ (4); F_i' — элементы вектора-столбца $\mathbf{F}'$, расположенные в i-позиции (строке) (12);

F_{i_A}, F_{i_B}, F_{i_C}, F_{i_D}, F_{i_E}, F_{i_G}, F_{i_H} — элементы вектора-столбца правой части системы, расположенные в позициях i_A, i_B, i_C, i_D, i_E, i_G, i_H, (12).

Количество элементов в ленте $\dfrac{NPK}{2}(2NK+1)-(KN+1)KN$.

Количество ненулевых элементов в ленте $19\dfrac{NPK}{2}-6(PK+PN+NK)+$ $+2(P+N+K)$.

Максимальная ширина ленты $2NK+1$.

Заметим, что модифицированный вариант алгоритма по схеме D4, базирующийся на соотношениях (10)–(14), требует для запоминания индексов ненулевых элементов разреженной матрицы коэффициентов $\mathbf{A}_4'$ и вектора-столбца $\mathbf{F}'$ (хранения массива номеров узлов $\zeta(n,p,k)$). Из этого следует, что накладные запросы памяти вычислительной системы на реализацию модифицированного варианта алгоритма по схемы D4 равны NPK.

Теперь сформулируем алгоритм решения исходной системы (1)–(3), представленной в матричном виде соотношением (6) на основе применения модифицированного варианта алгоритма с использованием схемы упорядочения D4 по шагам.

1. Задание исходных значений: $m=0$, $X^0_{n,p,k}$, $u_{n,p,k}$, $\mu_{n,p,k}$, $\sigma_{n,p,k}$, N, P, K, U_j, t_k, Δt, Δx, Δy, Δz для $n=\overline{1,N}$, $p=\overline{1,P}$, $k=\overline{1,K}$.

2. Нумерация узлов и определение позиций ненулевых элементов разреженной матрицы: нумерация узлов сетки дискретизации согласно схеме упорядочения D4 (см. таблицу) и формирование массива номеров узлов $=\zeta(n,p,k)$. Определение позиций i_A, i_B, i_C, i_D, i_E, i_G, i_H (12) ненулевых элементов матрицы коэффициентов $\mathbf{A}$ и вектора-столбца $\mathbf{B}$ с учетом ограничений на n,p,k. Определение позиций j_{R1}, j_{R2}, j_{R3}, j_{R4}, j_{R5}, j_{R6}, j_I, j_{L1}, j_{L2}, j_{L3}, j_{L4}, j_{L5}, j_{L6}, j_{Q1}, j_{Q2}, j_{Q3}, j_{Q4}, j_{Q5}, j_{Q6} ненулевых элементов матрицы $\mathbf{A}_4'$ (10).

3. Расчет элементов B_{1i} ($1\le I\le NPK/2$) и B_{2i} ($NPK/2+1\le i\le NPK$). Формирование векторов-столбцов $\mathbf{B}_1$ и $\mathbf{B}_2$.

4. Расчет элементов F_i' ($NPK/2+1\le i\le NPK$) (14). Формирование вектора-столбца $\mathbf{F}'$.

5. Расчет ненулевых элементов матрицы $\mathbf{A}$. Заполнение векторов-столбцов $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$, $\mathbf{C}$, $\mathbf{D}$, $\mathbf{E}$, $\mathbf{G}$, $\mathbf{H}$.

6. Расчет элементов $R1_{i,j_{R1}}$, $R2_{i,j_{R2}}$, $R3_{i,j_{R3}}$, $R4_{i,j_{R4}}$, $R5_{i,j_{R5}}$, $R6_{i,j_{R6}}$, $I1_{i,j1}$, $L1_{i,j_{L1}}$, $L2_{i,j_{L2}}$, $L3_{i,j_{L3}}$, $L4_{i,j_{L4}}$, $L5_{i,j_{L5}}$, $L6_{i,j_{L6}}$, $Q1_{i,j_{Q1}}$, $Q2_{i,j_{Q2}}$, $Q3_{i,j_{Q3}}$, $Q4_{i,j_{Q4}}$, $Q5_{i,j_{Q5}}$, $Q6_{i,j_{Q6}}$ (13). Формирование матрицы $\mathbf{A}_4'$.

7. Решение системы линейных уравнений (8). Определение вектора-столбца решений $\mathbf{X}_2^{m+1}$.

8. Решение системы линейных уравнений (9). Определение вектора-столбца решений $\mathbf{X}_1^{m+1}$.

9. Формирование вектора-столбца решений $\mathbf{X}^{m+1}$ из $\mathbf{X}_1^{m+1}$ и $\mathbf{X}_2^{m+1}$.

10. Переупорядочение вектора-столбца $\mathbf{X}^{m+1}$ в массив $X_{n,p,k}^{m+1}$ для $n=1,N$, $p=1,P$, $k=1,K$ и сохранение его в памяти.

11. Если $m<t_k$, то $m=m+1$ и переход к 3, иначе переход к 12.

12. Окончание алгоритма.

Для реализации представленного алгоритма требуется применение программ, реализующих методы решения системы линейных уравнений большой размерности с матрицей коэффициентов ленточного типа. Такие методы рассмотрены в работах [8, 11].

Предложенный подход и реализованный алгоритм обработки исходной информации системы атмосферного мониторинга и прогнозирования состояния воздушного бассейна позволяет существенно сократить время запаздывания поступления информации для лиц, принимающих решения, и, как следствие, обеспечить принятие и реализацию решений в динамике возможного отклонения технологических и других производственных процессов от штатных режимов.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Марчук Г.И., Кондратьев К.Я.* Приоритеты глобальной экологии. — М.: Наука, 1992. — 261с.
2. *Примак А.В., Кафаров В.В., Качиашвили К.И.* Системный анализ контроля и управления качеством воздуха и воды. — Киев: Наук. думка, 1991. — 360 с.
3. *Price H.S. and Coats K.H.* Direct methods in reservoir simulation // Trans. SPE of AIME. — 1974. — **14,** № 3. — P. 295–308.
4. *Ажогин В.В., Згуровский М.З., Корбич Ю.* Методы фильтрации и управления стохастическими процессами с распределенными параметрами. — Киев: Выща шк., 1988. — 448 с.
5. *Фарлоу Стенли Дж.* Уравнения с частными производными для научных работников и инженеров. — М.: Мир, 1985. — 383 с.
6. *Азиз Х., Сеттари Э.* Математическое моделирование пластовых систем. — М.: Недра, 1982. — 407 с.
7. *Джордж А., Лю Дж.* Численное решение больших разреженных систем уравнений. — М.: Мир, 1984. — 333с.
8. *Писсанецки С.* Технология разреженных матриц. — М.: Мир, 1988. — 410 с.
9. *Згуровский М.З., Новиков А.Н.* Системный анализ стохастических распределенных процессов. — Киев: КПИ, 1988. — 204 с.
10. *Згуровский М.З., Новиков А.Н.* Анализ и управление односторонними физическими процессами. — Киев: Наук. думка, 1996. — 328 с.
11. *Хорн Р., Джонсон Ч.* Матричный анализ. — М.: Мир, 1989. — 655 с.

Поступила 03.02.2004