

УДК 532.465

МЕТОД ВИПАДКОВИХ БЛУКАНЬ ДЛЯ НЕОДНОРІДНИХ ТЕЧІЙ ТА ДИФУЗІЇ

І. О. Бровченко[†], В. С. Мадерич, С. І. Ковалець

*Інститут проблем математичних машин та систем НАН України
проспект академіка Глушкова, 42, 03187, Київ, Україна*

[†]*E-mail: ibrovchenko@gmail.com*

Отримано 20.03.2018

Фізичний і математичний опис переносу пасивних домішок полем швидкості в течії рідини — адвекції — важливий з точки зору моделювання поширення забруднень різної природи на поверхнях акваторій. У ряді випадків не можна нехтувати впливом молекулярної дифузії на процес адвекції. Дану статтю присвячено розробці методів числового моделювання переносу пасивних частинок в полях неоднорідних течій при наявності дифузії. З'ясовано, що при розв'язанні рівняння переносу та дифузії методом випадкових блукань центр мас ансамблю частинок, або математичного сподівання положення кожної окремої частинки не збігається з лініями току, побудованими за векторним полем швидкості. Показано, що при ненульовій другій похідній від швидкості по просторовій координаті відхилення від лінії току має другий порядок малості. Виведено вирази для поправочних членів у рівнянні руху пасивної частинки. Показано, що використання методів інтегрування траєкторії високої точності в методах випадкових блукань може призводити до значних похибок, пов'язаних з дисперсією частинки протягом руху. Встановлено, що використання схем високого порядку точності без урахування поправочних членів вносить більшу похибку, аніж застосування схеми першого порядку точності. Виведено рівняння для моментів розподілу положення частинки, які пов'язують дисперсію й математичне сподівання з неоднорідним полем швидкості та коефіцієнта дифузії. Вони можуть бути використані при побудові методів випадкових блукань високої точності. Запропоновано підхід, який дозволяє будувати чисельні схеми тривимірного переносу з урахуванням впливу дисперсії частинок на рух центру мас, а також впливу неоднорідності поля течії на дисперсію розподілу координат частинок. Справедливість виведених рівнянь проілюстровано аналітичними викладками й чисельними розрахунками на прикладах двовимірних задач.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: *переніс, дифузія, стохастичні методи, випадкові блукання*

1. ВСТУП

Розв'язання рівняння переносу методом частинок, які вважаються пасивними домішками, зводиться до інтегрування траєкторії в неоднорідному полі течії, тобто до розв'язку рівняння

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{u}_c(x, t), \quad (1)$$

де \vec{x} — вектор координат частинки, а $\vec{u}_c(x, t)$ — поле швидкості. Стандартними способами розв'язання такої задачі є методи Рунге–Кутга четвертого та більш високих порядків.

Для моделювання процесу дифузії зазвичай використовують методи випадкових блукань, які описуються стохастичним диференціальним рівнянням Іто [1–4].

$$d\vec{x} = (\vec{u}_c(x, t) + \vec{\nabla} \cdot \mathbf{K})dt + \mathbf{V}d\vec{W}. \quad (2)$$

Тут \mathbf{K} — симетричний додатньо визначений тензор дифузії; \mathbf{V} визначається зі співвідношення $\mathbf{K} = 1/2\mathbf{V} \cdot \mathbf{V}^T$; \vec{W} — тривимірний Вінерівський випадковий процес, приріст якого має нормальний розподіл з нульовим математичним сподіванням і дисперсією dt . Матриця \mathbf{V} може визначена з симетричної матриці \mathbf{K} неоднозначно, але будь-яка з матриць, які задовольняють умову $\mathbf{K} = 1/2\mathbf{V} \cdot \mathbf{V}^T$ задає статистично ідентичні процеси. Якщо \mathbf{K} має діагональний вигляд, то $B_{ii} = \sqrt{2K_{ii}}$. Для ізотропної дифузії буде $K_{ij} = K_d\delta_{ij}$, а $B_{ii} = \sqrt{2K_d}$, де K_d — коефіцієнт дифузії.

Добре відомо, що неоднорідність у просторі коефіцієнта дифузії призводить до додаткової швидкості переносу, яка дорівнює градієнту коефіцієнта дифузії [5]. Стандартною для моделювання переносу та дифузії, що використовується в більшості моделей частинок [6–10], є чисельна схема:

$$\vec{x}(t_0 + \Delta t) = \vec{x}(t_0) + (\vec{u}_c + \vec{\nabla} \cdot \mathbf{K})|_{t=t_0}\Delta t + \sqrt{\Delta t}\mathbf{V}\vec{R}. \quad (3)$$

де $\vec{x}(t_0 + \Delta t)$ — координати частинки на наступному часовому кроці; $\vec{x}(t_0)$ — координати частинки на поточному часовому кроці t_0 ; \vec{R} — вектор, компонентами якого є випадкові величини з нульовим математичним сподіванням та одиничним середньоквадратичним відхиленням. Для діагонального тензора дифузії буде $\sqrt{\Delta t}\mathbf{V}\vec{R} = \sqrt{2K_{ii}\Delta t}$, $i = \bar{1}, 3$. Компоненти такого вектора — середньоквадратичні відхилення розподілу координат частинки по кожній осі координат через час Δt . У випадку ізотропної дифузії це співпадає зі співвідношенням Ейнштейна–Смолуховського для браунівського руху [11]: $\delta^2 = 2D_t\Delta t$, де δ^2 — дисперсія, D_t — коефіцієнт молекулярної дифузії.

Зазначена схема має порядок $O(\Delta t^{1/2})$ в сильному сенсі та порядок $O(\Delta t)$ в слабкому сенсі (див., наприклад, огляд [12]). Питання про те, яким чином для такої задачі будувати схеми переносу високих порядків точності та розраховувати параметри розподілу розташування частинок, залишається відкритим. Виходячи з цього, в даній статті наводиться загальний підхід до побудови схем високого порядку у тривимірному випадку та виведення рівняння для розрахунку параметрів розподілу частинок для двовимірних течій. Тут ми дотримуємось методології робіт [13, 14], в яких отримано наближену схему випадкових блукань для одновимірної задачі, а також ідей, викладених в [15], де виведено рівняння для моментів розподілу у випадку тривимірного переносу з молекулярною дифузиею.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Здійснюючи постановку задачі, спершу розглянемо двовимірне рівняння переносу та ізотропної дифузії:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial u_c C}{\partial x} - \frac{\partial v_c C}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} K_d \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} K_d \frac{\partial C}{\partial y}. \quad (4)$$

За початкову умову виберемо $C(x, y, 0) = \delta(x_0, y_0)$, що дозволяє вважати залежність $C(x, y, t)$ функцією розподілу ймовірності положення частинки з початковим положенням (x_0, y_0) .

За означенням моментом i, j -го порядку випадкової величини називають функцію

$$M_{i,j}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x^i y^j C(x, y, t) dx dy. \quad (5)$$

Відповідні центральні моменти мають вигляд

$$\mu_{i,j}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (x - M_{1,0}(t))^i (y - M_{0,1}(t))^j C(x, y, t) dx dy. \quad (6)$$

Домноживши рівняння переносу (4) на x , та проінтегрувавши в межах $[-\infty, +\infty]$ за умови, що $C, \partial C/\partial x \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$, отримуємо вираз для перших моментів $M_{1,0}$:

$$\frac{dM_{1,0}}{dt} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} u C dx dy, \quad \frac{dM_{0,1}}{dt} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} v C dx dy. \quad (7)$$

Тут уведено позначення $u = u_c + \partial K_d/\partial x$, $v = v_c + \partial K_d/\partial y$.

Таким чином, траєкторія центру мас не залежить явно від дисперсії розподілу положення частинки, а є функцією виключно поля швидкості, яке можна розглядати як суму поля швидкості течії та градієнта коефіцієнта дифузії. Покладемо тепер $x_0 = 0$, $y_0 = 0$ й розкладемо поле швидкості u в ряд Маклорена по просторових координатах:

$$u(x, y, t) = u_0 + x \frac{\partial u_0}{\partial x} + y \frac{\partial u_0}{\partial y} + \frac{x^2}{2} \frac{\partial^2 u_0}{\partial x^2} + xy \frac{\partial^2 u_0}{\partial x \partial y} + \frac{y^2}{2} \frac{\partial^2 u_0}{\partial y^2} + \dots \quad (8)$$

Підставивши цей розклад у вираз для $M_{1,0}$ отримаємо

$$\frac{dM_{1,0}}{dt} = u_0 + M_{1,0} \frac{\partial u_0}{\partial x} + M_{0,1} \frac{\partial u_0}{\partial y} + \frac{M_{2,0}}{2} \frac{\partial^2 u_0}{\partial x^2} + M_{1,1} \frac{\partial^2 u_0}{\partial x \partial y} + \frac{M_{0,2}}{2} \frac{\partial^2 u_0}{\partial y^2} + \dots \quad (9)$$

Припустимо, що коефіцієнт дифузії дорівнює нулеві — $K_d = 0$. Тоді нульові значення мають також дисперсія $\mu_{2,0}$ і всі центральні моменти. Звідси випливає, що $M_{2,0} = \mu_{2,0} + M_{1,0}^2 = M_{1,0}^2$, $M_{3,0} = M_{1,0}^3$ і т. д. Тоді вираз для зміщення центру мас перетворюється на звичайне рівняння інтегрування траєкторії:

$$\frac{dM_{1,0}}{dt} = u(M_{1,0}, M_{0,1}, t). \quad (10)$$

Але таку рівність не можна записати при ненульовому (навіть постійному в просторі) коефіцієнті дифузії. У цьому випадку $M_{2,0} \neq M_{1,0}^2$ і формула (10) стає невірною. Тому для побудови схем більш високих порядків точності, ніж другий, необхідно обчислювати моменти вищих порядків.

3. ТРИВИМІРНІ РІВНЯННЯ ДЛЯ МОМЕНТІВ РОЗПОДІЛУ

При побудові чисельної схеми розв'язання рівняння переносу та дифузії методом частинок необхідно визначити з часовим кроком Δt положення центру мас частинки (перший момент) а також параметри розподілу її положення, які задаються моментами вищих порядків. Для того, щоб побудувати чисельну схему випадкових блукань з неоднорідною дифузиею, розглянемо тривимірне рівняння адвекції–дифузії в консервативному вигляді та методи його розв'язання лагранжевим методом. Згадане рівняння має такий вигляд:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial uC}{\partial x} - \frac{\partial vC}{\partial y} - \frac{\partial wC}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x}K_d \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}K_d \frac{\partial C}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z}D \frac{\partial C}{\partial z}. \quad (11)$$

Тут $C = C(x, y, z, t)$ — концентрація речовини; $u = u(\vec{x}, t)$, $v = v(\vec{x}, t)$, $w = w(\vec{x}, t)$ — тривимірне поле швидкості; тензор дифузії має ненульові тільки діагональні елементи ($K_{xx} = K_{yy} = K_d$, $K_{zz} = D$; $K_d = K_d(\vec{x}, t)$, $D = D(\vec{x}, t)$ — коефіцієнти горизонтальної та вертикальної дифузії, відповідно.

Як і в одновимірному випадку, викладеному в роботах [13, 14], побудуємо такий розподіл положення кожної окремої частинки, при якому математичне сподівання та дисперсія задаються розв'язком рівняння (11). Домноживши обидві частини рівняння (11) на $x^i y^j z^k$, отримаємо систему звичайних диференціальних рівнянь для моментів розподілу випадкової величини:

$$\begin{aligned} \frac{dM_{i,j,k}}{dt} = & \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (ix^{i-1}y^jz^k u + jx^i y^{j-1} z^k v + kx^i y^j z^{k-1} w) C dx dy dz + \\ & + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x^i y^j z^k (i(i-1)K_d x^{-2} + j(j-1)K_d y^{-2} + k(k-1)D z^{-2}) C dx dy dz. \end{aligned} \quad (12)$$

Для того, щоб знайти інтеграли, присутні в рівняннях (12), можна розкласти невідомі функції $u(x, y, z, t)$, $v(x, y, z, t)$, $w(x, y, z, t)$, $K_d(x, y, z, t)$, $D(x, y, z, t)$ в степеневі ряди Маклорена по просторових координатах. Тоді інтеграли будуть виражені через ряди з моментами розподілу:

$$\begin{aligned} \frac{dM_{i,j,k}}{dt} = & \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} i\alpha_{nml}^1 M_{i+n-1, j+m, k+l} + j\alpha_{nml}^2 M_{i+n, j+m-1, k+l} + \\ & + k\alpha_{nml}^3 M_{i+n, j+m, k+l-1} + i(i-1)\alpha_{nml}^4 M_{i+n-2, j+m, k+l} + \\ & + j(j-1)\alpha_{nml}^4 M_{i+n, j+m-2, k+l} + k(k-1)\alpha_{nml}^5 M_{i+n, j+m, k+l-2}. \end{aligned} \quad (13)$$

$$(\alpha_{nml}^1, \alpha_{nml}^2, \alpha_{nml}^3, \alpha_{nml}^4, \alpha_{nml}^5) = \frac{1}{n!m!l!} \frac{\partial^{(n+m+l)}}{\partial x^n \partial y^m \partial z^l} (u_0, v_0, w_0, K_{d0}, D_0). \quad (14)$$

Рівняння (13) є нескінченною лінійною системою звичайних диференціальних рівнянь відносно моментів розподілу випадкової величини. Більш детальні викладки з цього приводу наведені в [16]. Аналогічні рівняння в рухомій системі координат при постійному коефіцієнті молекулярної дифузії отримані раніше в [15].

Тепер можна отримати скінчену систему рівнянь бажаної точності, відкинувши члени більш високих порядків. Нижче проаналізуємо застосування такого підходу для деяких видів течій.

4. ДВОВИМІРНИЙ РУХ З ІЗОТРОПНОЮ ДИФУЗІЄЮ

Для того, щоб побудувати схему випадкових блукань у двовимірному просторі, необхідно визначати зміщення центру мас та обчислити дисперсію розподілу. Використовуючи формули (12) та залишаючи члени до другої похідної включно в розкладенні ??, виведемо рівняння для положення центру мас. Використавши, що $M_{2,0} = M_x^2 + \mu_{2,0}$, $M_{1,1} = M_x M_y + \mu_{1,1}$, отримаємо:

$$\begin{aligned}\frac{dM_x}{dt} &= u(M_x, M_y) + \frac{1}{2}u''_{xx}\mu_{2,0} + u''_{xy}\mu_{1,1} + \frac{1}{2}u''_{yy}\mu_{0,2}, \\ \frac{dM_y}{dt} &= v(M_x, M_y) + \frac{1}{2}v''_{xx}\mu_{2,0} + v''_{xy}\mu_{1,1} + \frac{1}{2}v''_{yy}\mu_{0,2}.\end{aligned}\quad (15)$$

Тут для спрощення використано позначення $M_{1,0} = M_x$, $M_{0,1} = M_y$. Останні три члени в рівняннях (15) задають поправку до рівняння траєкторії, яку необхідно враховувати при його інтегруванні схемами високого порядку точності.

Для того, щоб вивести рівняння для дисперсії $\delta_x^2 = \mu_{2,0}$, $\delta_y^2 = \mu_{0,2}$, скористаємося співвідношенням

$$\frac{d\delta_x^2}{dt} = \frac{d(M_{2,0} - M_x^2)}{dt} = \frac{dM_{2,0}}{dt} - 2M_x \frac{dM_x}{dt}, \quad (16)$$

де вважаємо, що $dM_{2,0}/dt$ та dM_x/dt отримані з рівняння (12). Виразивши моменти всіх порядків через M_x , M_y і центральні моменти, отримаємо:

$$\begin{aligned}\frac{d\delta_x^2}{dt} &= 2K_d(M_x, M_y) + 2\delta_x^2 u'_y + u'_{xx}(\mu_{3,0} + 2M_x \delta_x^2) + u'_{yy}(\mu_{1,2} + 2\mu_{1,1} M_y) + \\ &\quad + 2u''_{xy}(\mu_{2,1} + \delta_x^2 M_y + M_x \mu_{1,1}) + \frac{1}{2}\delta_x^2 K''_{dxx} + \mu_{1,1} K''_{dxy} + \frac{1}{2}\delta_y^2 K''_{dyy}, \\ \frac{d\delta_y^2}{dt} &= 2K_d(M_x, M_y) + 2\mu_{1,1} v'_x + 2\delta_y^2 v'_y + v''_{xx}(\mu_{2,1} + 2M_x \mu_{1,1}) + v''_{yy}(\mu_{0,3} + 2M_y \delta_y^2) + \\ &\quad + 2v''_{xy}(\mu_{1,2} + \mu_{1,1} M_y + \delta_y^2 M_x) + \frac{1}{2}\delta_x^2 K''_{dxx} + \mu_{1,1} K''_{dxy} + \frac{1}{2}\delta_y^2 K''_{dyy}, \\ \frac{d\mu_{1,1}}{dt} &= \mu_{1,1}(u'_x + v'_y + M_x(u''_{xx} + v''_{xy}) + M_y(u''_{xy} + v''_{yy})) + u'_y \delta_y^2 + v'_x \delta_x^2 + \\ &\quad + \frac{1}{2}(u''_{xx}\mu_{2,1} + v''_{yy}\mu_{1,2}) + u''_{xy}(\mu_{1,2} + M_x \delta_y^2) + \frac{1}{2}u''_{yy}(\mu_{0,3} + 2M_z \delta_y^2) + \\ &\quad + \frac{1}{2}v''_{xx}(\mu_{3,0} + 2M_x \delta_x^2) + v''_{xy}(\mu_{2,1} + M_y \delta_x^2).\end{aligned}\quad (17)$$

При $t = 0$ всі моменти мають нульові значення, окрім моменту нульового порядку, який тотожно дорівнює одиниці при будь-якому $0 \geq t < +\infty$. Отже з рівнянь (15), (17)

видно, що величини M_x , M_y , δ_x^2 , δ_y^2 мають перший порядок малості по часу, а момент $\mu_{1,1}$ — другий порядок малості. Моменти $\mu_{1,2}$, $\mu_{2,1}$, $\mu_{3,0}$, $\mu_{0,3}$ мають більш високі порядки малості [15], тому ними можна знехтувати. Таким чином, утримуючи члени не вище другого порядку малості, переходимо до простіших виразів:

$$\begin{aligned}\frac{d\delta_x^2}{dt} &= 2K_d(M_x, M_y) + 2\delta_x^2 u'_x + 2u''_{xy} M_x \delta_x^2 + \delta_x^2 K''_{dxx} + \delta_y^2 K''_{dyy} + \mu_{1,1}(2u'_y + K''_{dxy}), \\ \frac{d\delta_y^2}{dt} &= 2K_d(M_x, M_y) + 2\delta_y^2 v'_y + 2v''_{xy}(\delta_y^2 M_x) + 2v''_{yy} M_y \delta_y^2 + \\ &\quad + \delta_x^2 K''_{xx} + \delta_y^2 K''_{yy} + \mu_{1,1}(2v'_x + K''_{dxy}),\end{aligned}\tag{18}$$

$$\frac{d\mu_{1,1}}{dt} = \mu_{1,1}(u'_x + v'_y) + u'_y \delta_y^2 + v'_x \delta_x^2 + u''_{xy} M_x \delta_y^2 + u''_{yy} M_y \delta_x^2 + v''_{xx} M_x \delta_y^2 + v''_{xy} M_y \delta_x^2.$$

Якщо знехтувати ще членами другого порядку, які стоять при других похідних від поля швидкості й коефіцієнта дифузії, а в рівнянні для $\mu_{1,1}$ — ще й першим членом, що містить дивергентність потоку, то отримаємо:

$$\begin{aligned}\frac{d\delta_x^2}{dt} &= 2K_d(M_x, M_y) + 2\delta_x^2 u'_x + 2\mu_{1,1} u'_y, \\ \frac{d\delta_y^2}{dt} &= 2K_d(M_x, M_y) + 2\delta_y^2 v'_y + 2\mu_{1,1} v'_x, \\ \frac{d\mu_{1,1}}{dt} &= u'_y \delta_y^2 + v'_x \delta_x^2.\end{aligned}\tag{19}$$

З рівняння (19) випливає, що, навіть при лінійному полі швидкості та постійному коефіцієнті дифузії, дисперсія розподілу буде спотворюватись і відхилятись від класичного закону $\delta^2 = 2K_d t$ через неоднорідність поля швидкості. Також ненульовою може бути коваріація $\mu_{1,1}$ — хоча вона й має більший порядок малості, ніж дисперсія, відіграє важливу роль для дивергентних потоків. Тому при побудові чисельних схем методу випадкових блукань необхідно враховувати поправку на неоднорідність поля течії. Рівняння для розрахунку дисперсії без впливу градієнтів поля швидкості наведені в [17]. Вплив зсуву й дивергенції на дисперсію розподілу розглядався в роботах [5, 18] для деяких часткових випадків двовимірного руху. Рівняння (19) є узагальненням результатів цих робіт для випадку довільних течій.

Окрім того, рівняння (15) дозволяють описати відхилення центру мас частинки від лінії току. Для врахування залежності випадкових зміщень по x та y (для не малого $\mu_{1,1}$) необхідно знайти головні напрямки, власні числа та вектори матриці коваріації

$$\text{Cov}_{xy} = \begin{pmatrix} \delta_x^2 & \mu_{1,1} \\ \mu_{1,1} & \delta_y^2 \end{pmatrix}\tag{20}$$

Далі слід зробити випадкові кроки в напрямку головних напрямків з дисперсією $\sqrt{2\lambda_i}$, де λ_i — власні числа матриці коваріації. Більш детально алгоритм генерування анізотропних випадкових величин викладено, наприклад, в [5].

Після розв'язання системи рівнянь (15), (19) чисельна схема для розрахунку положення частинки в наступний момент часу матиме вигляд

$$\begin{aligned}x(t_0 + \Delta t) &= x(t_0) + M_x(t_0 + \Delta t) + R_x \sqrt{\delta_x^2(t_0 + \Delta t)}, \\y(t_0 + \Delta t) &= y(t_0) + M_y(t_0 + \Delta t) + R_y \sqrt{\delta_y^2(t_0 + \Delta t)},\end{aligned}\tag{21}$$

де R_x, R_y — незалежні випадкові величини з нульовим математичним сподіванням і одиничним середньоквадратичним відхиленням.

Варто порівняти отримані результати з рівняннями, наведеними у розділі про дифузію частинок у турбулентному потоці в роботі [15]. У ній досліджувався вплив молекулярної дифузії на дисперсію частинок в турбулентному полі течії. При цьому виконувався перехід у систему координат, яка рухається вздовж лінії току. Зрештою було виведено рівняння для моментів розподілу, дуже подібні до співвідношень (13). Також отримано декілька членів розкладу для нижчих моментів. Ідейно-методична база та деякі результати цього дослідження цілком застосовні до рівнянь турбулентного переносу зі змінним коефіцієнтом дифузії. Слід зазначити, що моменти, рівняння для яких виводяться в [15], не є центральними, так як вони записані відносно лінії току, а не відносно математичного сподівання положення частинки. Утім, отримані оцінки малості справедливі й для рівнянь переносу з неоднорідним коефіцієнтом дифузії. Таким чином, отримані в нашій роботі рівняння можна розглядати як узагальнення й уточнення результатів [15].

Користуючись співвідношеннями (15), (19), можна дати оцінки величини часового кроку, яка дозволяє врахувати виведені поправки в рівняннях для траєкторії та дисперсії. З рівняння (15) можна зробити висновок, що поправочними членами можна знехтувати при $\delta^2 \ll x^2$, тобто коли середньоквадратичне відхилення набагато менше за горизонтальне зміщення. Характерний масштаб для горизонтального зміщення становить $u_0 t$, а для дисперсії — $2K_{d0} t$. Звідси отримуємо таку оцінку для часового кроку:

$$\Delta t \gg \frac{2K_{d0}}{u_0^2}.\tag{22}$$

З іншого боку, з рівняння (19) видно, що поправочним членом можна знехтувати при $\delta^2 du/dx \ll K_d$, тобто

$$\Delta t \ll \frac{2}{du/dx}.\tag{23}$$

Якщо згадати, що $u = u_c + \partial K_d / \partial x$ то отримаємо критерій узгоджений з отриманим у [14] для випадку одновимірної дифузії без переносу: $\Delta t \ll 1 / \partial_{xx} K_d$.

5. ДВОВИМІРНИЙ РУХ ПО КОЛУ З ОДНОРІДНОЮ ДИФУЗІЄЮ

Одною зі стандартних перевірок для розв'язання рівняння переносу є рух по колу зі сталою кутовою швидкістю ω при постійному коефіцієнті дифузії K_{d0} . Тоді при русі проти годинникової стрілки

$$u = -\omega y, \quad v = \omega x.\tag{24}$$

Поле швидкості для такого випадку є лінійним, а система для обчислення моментів набуває вигляду

$$\begin{aligned}\frac{dM_x}{dt} &= -\omega M_y, & \frac{dM_y}{dt} &= \omega M_x, \\ \frac{d\delta_x^2}{dt} &= 2K_{d0} - 2\omega\mu_{1,1}, & \frac{d\delta_y^2}{dt} &= 2K_{d0} + 2\omega\mu_{1,1}, \\ \frac{d\mu_{1,1}}{dt} &= \omega(\delta_x^2 - \delta_y^2).\end{aligned}\tag{25}$$

З системи (25) видно, що перші два рівняння для перших моментів можна розв'язати незалежно від останніх трьох, які описують другі моменти. Це означає, що зміщення центру мас не залежить від процесу дифузії. Розв'язок цієї системи з початковими умовами $M_x = x_0$, $M_y = y_0$, $\mu_{1,1} = 0$, $\delta_x^2 = \delta_y^2 = 0$ має вигляд

$$\begin{aligned}M_x &= -y_0 \sin(\omega t) + x_0 \cos(\omega t), & M_y &= y_0 \cos(\omega t) + x_0 \sin(\omega t), \\ \mu_{1,1} &= 0, & \delta_x^2 &= \delta_y^2 = 2K_{d0}t.\end{aligned}\tag{26}$$

З розв'язку (26) видно, що для течій з постійною дифузиею та лінійним полем швидкості, в якому $\partial u/\partial x = \partial v/\partial y = 0$, процеси переносу та дифузії будуть незалежними і для їх моделювання можна використовувати стандартні підходи. У цьому випадку дисперсія не залежить від течії, тому рівняння для дисперсії в системі (19) не залежить від поля швидкості.

6. ДВОВИМІРНИЙ РУХ ПО СПРАЛІ

Розглянемо тепер випадок, коли поле швидкості лінійно залежить від обох просторових координат. Прикладом такого руху є рух по логарифмічній спіралі проти годинникової стрілки до центру, яка задається рівняннями

$$\begin{aligned}x(t) &= re^{-bt} \cos \omega t, \\ y(t) &= re^{-bt} \sin \omega t.\end{aligned}\tag{27}$$

У цьому випадку поле швидкості задається таким чином:

$$\begin{aligned}u &= -bx - \omega y, \\ v &= \omega x - by.\end{aligned}\tag{28}$$

Поле швидкості (28) не є бездивергентним, тобто $\partial u/\partial x + \partial v/\partial y \neq 0$. Такі двовимірні рухи можуть виникати при розповсюдженні плавучих об'єктів (сміття, буїв, нафтових плівок) по поверхні води. Нескладно показати, що, для однорідного коефіцієнта дифузії K_{d0} , розв'язок рівняння (19) для такої задачі буде

$$\delta_x^2 = \delta_y^2 = \frac{K_{d0}}{b}(1 - e^{-2bt}).\tag{29}$$

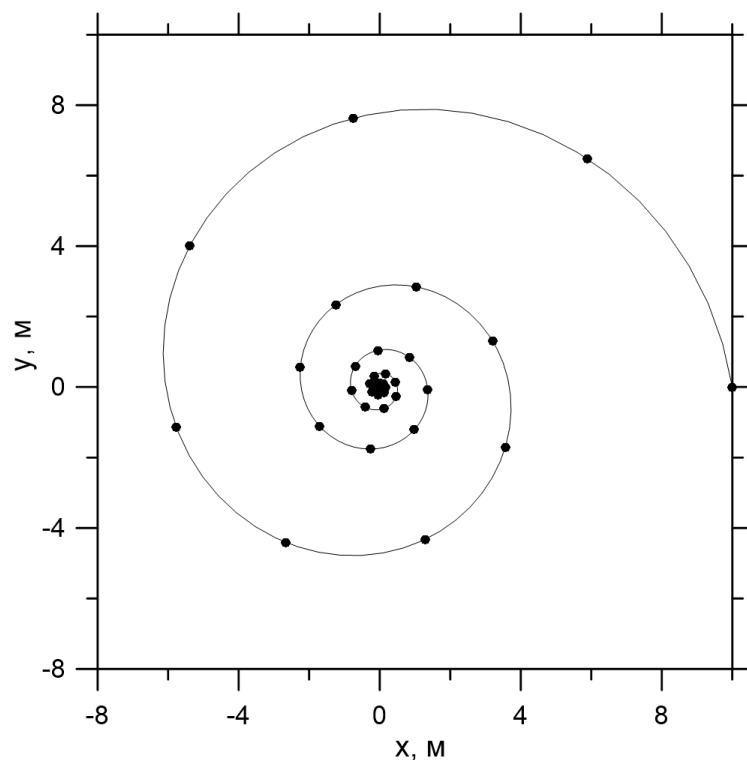


Рис. 1. Порівняння заданої лінії току (неперервна лінія) з розрахованими центрами мас ансамблю частинок, побудованими послідовно з часовим інтервалом $\Delta t = 8$ с (маркери ●)

Із виразу (29) видно, що при малих значеннях t дисперсія відбувається згідно з класичним законом $\delta^2 = 2K_{d0}t$, але при збільшенні часу вона прямує до свого граничного значення $\delta^2 = K_{d0}/b$.

Для оцінки важливості отриманих поправочних членів в рівнянні (19), перенос та дифузію розраховували методом випадкових блукань, використовуючи 10^6 частинок. При цьому було обрано такі чисельні параметри: $\omega = 2\pi/60$ с $^{-1}$ — один оберт на хвилину, $b = 1/60$ с $^{-1}$, $K_{d0} = 0.01$ м, 2 с $^{-1}$, $x_0 = 10$ м, $y_0 = 0$ м. Часовий крок становив $\Delta t = 8$ с. На кожному кроці для знаходження M_x , M_y , δ_x^2 , δ_y^2 система рівнянь (15), (19) розв'язувалась чисельно методом Рунге–Кутта четвертого порядку. На кожному часовому кроці для положення центру мас задавались початкові умови — поточні положення частинок при дисперсії $\delta^2 = 0$. Потім кожна частинка зміщувалась згідно з формулами (21). На додачу до цього було проведено розрахунок, в якому дисперсія не визначалася з рівняння (19), а задавалася як $\delta^2 = 2K_{d0}\Delta t$.

На Рис. 1 дано порівняння заданої лінії току з траєкторією положення центра мас, знайденого чисельним методом за ансамблем частинок. Із графіка видно, що центр мас точно слідує по заданій траєкторії, починаючи з початкового положення. Це свідчить про те, що для моделювання обрано достатню кількість частинок. Як і передбачалось, при лінійному полі швидкості центр мас ансамблю частинок не відхиляється від лінії току. На Рис. 2 показано зміну в часі дисперсії ансамблю частинок при використанні розв'язку рівняння (19) та співвідношення $\delta^2 = 2K_{d0}\Delta t$. Видно, що припущення про лінійну залежність δ^2 від кроку по часу призводить до систематичного завищення

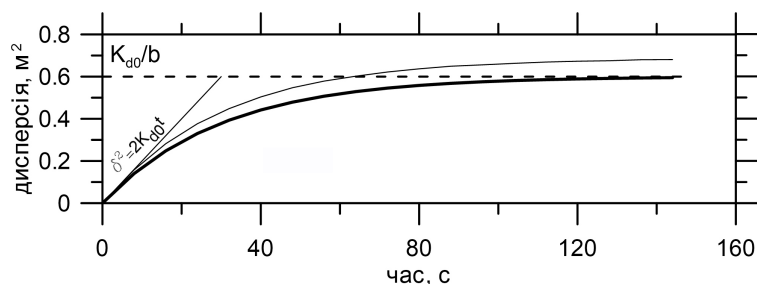


Рис. 2. Порівняння дисперсії координат ансамблю частинок, розрахованих за різними методиками:

неперервна товста — на основі рівнянь (19); неперервна тонка — на основі співвідношення $\delta^2 = 2K_0\Delta t$; штрихова $\delta^2 = K_{d0}/b$ — асимптотика аналітичного розв'язку при великих t ; пряма $\delta^2 = K_{d0}t$ — асимптотика аналітичного розв'язку при малих t

дисперсії кожної окремої частинки. Як результат це призводить до завищення оцінки дисперсії ансамблю частинок. У той же час, використання формули (19) дозволяє отримати чисельно розв'язок, який співпадає з аналітичним. При зменшенні часового кроку розв'язок, отриманий на основі класичного співвідношення також прямує до аналітичного, але використання формул (19) дозволяє збільшити часовий крок у розрахунках і показати важливість поправочних членів при побудові чисельних схем інтегрування траєкторій високих порядків.

7. ДИФУЗИЯ В ЛОГАРИФМІЧНОМУ ПРИМЕЖОВОМУ ШАРІ

Випадок нелінійного поля швидкості розглянемо на прикладі процесу переносу та дифузії в турбулентному примежовому шарі. В околі непроникної межі (поверхні) швидкість має логарифмічний профіль, а коефіцієнт дифузії збільшується лінійно з віддаленням від неї:

$$u(z) = \frac{u_*}{\kappa} \ln \left(\frac{z}{z_s} \right), \quad (30)$$

$$D(z) = \kappa u_* z.$$

де z_s — шорсткість поверхні, κ — константа Кармана, u_* — динамічна швидкість тертя (м/с). Будемо вважати, що вертикальним переносом та горизонтальною дифузією можна знехтувати ($w = 0$, $K_d = 0$).

Перенесемо початок координат у точку знаходження частинки $z(t_0) = z_0$ й запишемо розклад у ряд Маклорена швидкості та коефіцієнта турбулентної дифузії до другої похідної включно:

$$u(z) = u_0 + u'_0 z + \frac{z^2}{2} u''_0, \quad (31)$$

$$D(z) = D_0 + D'_0 z.$$

Тут $u_0 = u_*/\kappa \ln(z_0/z_s)$, $u'_0 = u_*/\kappa(1/z_0)$, $u''_0 = -u_*/\kappa(1/z_0)^2$, $D_0 = \kappa u_* z_0$, $D'_0 = \kappa u_*$.

Підставивши цей розклад у рівняння (12) отримаємо систему рівнянь для моментів:

$$\begin{aligned}\frac{dM_x}{dt} &= u_0 + u'_0 M_y + \frac{1}{2} u''_0 (M_y^2 + \delta_y^2), \\ \frac{dM_y}{dt} &= D'_0, \\ \frac{d\mu_{1,1}}{dt} &= \frac{1}{2} u''_0 \mu_{0,3} + u''_0 M_y \delta_y^2 + u'_0 \delta_y^2, \\ \frac{d\delta_x^2}{dt} &= 2u'_0 \mu_{1,1} + u''_0 \mu_{1,2} + 2u''_0 \mu_{1,1} M_y, \\ \frac{d\delta_y^2}{dt} &= 2D_0 + 2D'_0 M_y.\end{aligned}\tag{32}$$

Для того, щоб замкнути цю систему потрібно дописати до неї рівняння для $\mu_{1,2}$ і $\mu_{0,3}$. Втім, зауважимо, що для нашого розгляду це непотрібно.

Якщо перенести початок координат у точку знаходження частинки, то початкові умови набудуть вигляду $\mu_{i,j} = 0$, $i, j = \overline{1, 2}$. Можна розв'язати окремо рівняння для M_y й підставити розв'язок у рівняння для $\mu_{0,2} = \delta_y^2$. У свою чергу, цей розв'язок можна підставити в рівняння для M_x і т. д. Послідовно отримаємо:

$$\begin{aligned}M_y &= D'_0 t, \\ M_x &= u_0 t + \frac{1}{2} u'_0 D'_0 t^2 + u''_0 \left(D_0 \frac{t^2}{2} + D_0'^2 \frac{t^3}{3} \right), \\ \delta_y^2 &= 2D_0 t + D_0'^2 t^2 = 2D \left(\frac{M_y}{2} \right) t.\end{aligned}\tag{33}$$

Якщо б ми інтегрували траєкторію руху частинки полем течій $u(z) = u_0 + u'_0 z + \frac{z^2}{2} u''_0$, $\omega = D'_0$, то, розв'язавши систему рівнянь

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= u_0 + u'_0 z + \frac{z^2}{2} u''_0, \\ \frac{dz}{dt} &= D'_0,\end{aligned}\tag{34}$$

отримали б такі вирази:

$$\begin{aligned}x(t) &= x(t_0) + u_0 t + \frac{1}{2} u'_0 D'_0 t^2 + u''_0 \frac{D_0'^2 t^3}{6}, \\ z(t) &= z(t_0) + D'_0 t.\end{aligned}\tag{35}$$

Порівнюючи їх з розв'язком (33) бачимо, що використавши для інтегрування траєкторії схему третього порядку точності, ми отримали похибку такого ж порядку малості. Отже, використання схеми порядку більше другого не підвищує точність чисельного алгоритму.

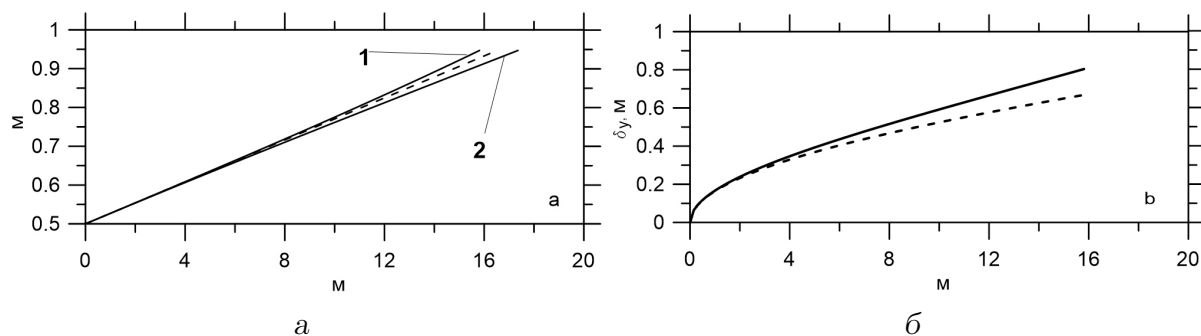


Рис. 3. Траєкторія (а) та середньоквадратичне відхилення (б) для різних чисельних схем:
 а – штрихова: $x(t) = x(0) + u_0 t$, $z(t) = z(0) + D'_0 t$; 1: за формулою (33); 2: за формулою (35);
 б – штрихова: $\delta_y = \sqrt{2D_0 t}$; неперервна: за формулою (33)

Для кількісного порівняння даних, отриманих за формулами (33) та (35) (див. Рис. 3) було обрано такі чисельні параметри: $t_0 = 0$ с, $z_s = 1$ мм, $z_0 = 50$ м, $z_s = 0.5$ м, $x_0 = 0$, $u_* = 0.1$ м/с. На Рис. 3а пунктирною лінією зображено лінійну траєкторію. Вона описується формулами $x(t) = x(0) + u_0 t$, $z(t) = z(0) + D'_0 t$, що відповідає чисельній схемі Ейлера першого порядку. Кривою 1 дано точний розв'язок системи (32), а кривою 2 – точний розв'язок системи (34). Обидві ці криві відповідають чисельному розв'язку третього порядку точності, бо утримують члени до третього порядку малості по часу включно. Звідси можна зробити такий висновок: хоча відмінність між трьома траєкторіями й незначна, дані, отримані з рівнянь (32), виявляються ближчими до результатів, отриманих за найпростішою схемою Ейлера, ніж до тих, які відповідають рівнянням (34). Таким чином, при використанні чисельних схем з порядком точності, більшим за другий, немає сенсу користуватися рівняннями руху без поправочних членів – у результаті похибка може збільшитися. На Рис. 3б наведено порівняння дисперсії, отриманої з рівнянь (33) з урахуванням неоднорідності коефіцієнта дифузії, з формулою $\delta_y = \sqrt{2K_0 t}$. Із графіка видно, що для неоднорідного коефіцієнту дифузії уточнення дисперсії розподілу може бути суттєвим.

8. ВИСНОВКИ

Показано, що при розв'язанні рівняння переносу та дифузії методом випадкових блукань центр мас ансамблю частинок, або математичного сподівання положення кожної окремої частинки не збігається з лініями току, побудованими за векторним полем $\vec{u} = \vec{u}_c(x, t) + \vec{\nabla} \cdot \mathbf{K}$. З'ясовано, що при ненульовій другій похідній від швидкості по просторовій координаті відхилення від лінії току має другий порядок малості. Виведено вирази для поправочних членів у рівнянні руху пасивної частинки. Встановлено, що використання схем високого порядку точності без урахування поправочних членів може вносити більшу похибку, аніж використання схеми першого порядку точності. Виведено рівняння для моментів розподілу положення частинки, які пов'язують дисперсію, математичне сподівання й неоднорідне поле швидкості та коефіцієнту дифузії. Вони можуть бути використані при побудові методів випадкових блукань високої точності. Запропоновано підхід, який дозволяє будувати чисельні схеми тривимірного переносу з урахуванням впливу дисперсії частинок на рух центру мас, а також впливу неоднорідно-

сті поля течії на дисперсію розподілу координат частинок. Отримані співвідношення й висновки узагальнюють результатів інших авторів для випадку довільних течій. Справедливість виведених рівнянь проілюстровано аналітичними викладками й чисельними розрахунками.

ЛІТЕРАТУРА

- [1] Gardiner C. Handbook of stochastic methods for physics, chemistry, and the natural sciences. Springer series in synergetics. — Springer-Verlag, 2004. — 420 p.
- [2] Adaptive time stepping algorithm for Lagrangian transport models: Theory and idealised test cases / Shah S. H. A. M., Heemink A. W., Grawe U., and Deleersnijder E. // Ocean Modelling. — 2013. — Vol. 68. — P. 9–21.
- [3] van Kooten J. J. A. Groundwater contaminant transport including adsorption and first order decay // Stochastic Hydrology and Hydraulics. — 1994. — Vol. 8. — P. 185–205.
- [4] Uffink G. J. M. Analysis of dispersion by the random walk method. — Technical University Delft. Thesis, 1990. — 158 p.
- [5] Particles in the coastal ocean: Theory and applications / Lynch D. R., Greenberg D. A., Bilgili A., McGillicuddy, jr. D. J., Manning J. P., and Aretxabaleta A. L. — New York : Cambridge University Press, 2013. — 570 p.
- [6] Wilson J. D., Sawford B. L. Review of Lagrangian stochastic models for trajectories in the turbulent atmosphere // Boundary-Layer Meteorology 25th Anniversary Volume, 1970–1995. — Dordrecht : Springer Netherlands, 1996. — P. 191–210.
- [7] Бровченко И. А., Мадерич В. С. Численный лагранжевый метод моделирования распространения поверхностных пятен нефти // Прикладна гідромеханіка. — 2002. — Т. 4(76), № 4. — С. 23–31.
- [8] Perianez R., Elliott A. A particle-tracking method for simulating the dispersion of non-conservative radionuclides in coastal waters // Journal of Environmental Radioactivity. — 2002. — Vol. 58, no. 1. — P. 13–33.
- [9] Бровченко И. А., Мадерич В. С. Трехмерная лагранжева модель переноса многофракционных наносов и ее применение к описанию гравитационных течений // Прикладна гідромеханіка. — 2008. — Т. 10(82), № 2. — С. 3–12.
- [10] A new comparison of marine dispersion model performances for Fukushima releases in the frame of IAEA MODARIA program / Perianez R., Brovchenko I., Duffa C., Jung K. T., Kobayashi T., Lamego F., Maderich V., Min B. I., Nies H., Osvath I., Psaltaki M., and Suh K. // Journal of Environmental Radioactivity. — 2015. — Vol. 150. — P. 247–269.
- [11] Эйнштейн А., Смолуховский М. Брауновское движение. — Москва / Ленинград : ОНТИ, 1936. — 608 с.

- [12] Lagrangian ocean analysis: Fundamentals and practices / van Sebille E., Griffies S. M., Abernathey R., Adams T. P., Berloff P., Biastoch A., Blanke B., Chassignet E. P., Cheng Y., Cotter C. J., Deleersnijder E., Doos K., Drake H. F., Drijfhout S., Gary S. F., Heemink A. W., Kjellsson J., Koszalka I. M., Lange M., Lique C., MacGilchrist G. A., Marsh R., Adame C. G. M., McAdam R., Nencioli F., Paris C. B., Piggott M. D., Polton J. A., Ru S., Shah S. H. A. M., Thomas M. D., Wang J., Wolfram P. J., Zanna L., and Zika J. D. // *Ocean Modelling*. — 2018. — Vol. 121. — P. 49–75.
- [13] Hunter J. R., Craig P. D., Phillips H. E. On the use of random walk models with spatially variable diffusivity // *Journal of Computational Physics*. — 1993. — Vol. 106, no. 2. — P. 366–376.
- [14] Visser A. W. Using random walk models to simulate the vertical distribution of particles in a turbulent water column // *Marine Ecology Progress Series*. — 1997. — Vol. 158. — P. 275–281.
- [15] Монин А. С., Яглом А. М. Статистическая гидромеханика. — Москва : Наука, 1965. — 640 с.
- [16] Бровченко І. О. Чисельні лагранжеві методи в задачах прибережної гідродинаміки : Ph. D. thesis ; Інститут гідромеханіки НАН України. — Київ, 2017. — 370 с.
- [17] Bennett A. *Lagrangian Fluid Mechanics*. — New York : Cambridge University Press, 2006. — 309 p.
- [18] Lynch D. R., Smith K. W. Lagrangian dispersion in sheared flow // *Continental Shelf Research*. — 2010. — Vol. 30, no. 20. — P. 2092–2105.

REFERENCES

- [1] C. Gardiner, *Handbook of stochastic methods for physics, chemistry, and the natural sciences*. Springer series in synergetics, Springer-Verlag, 2004.
- [2] S. H. A. M. Shah, A. W. Heemink, U. Grawe, and E. Deleersnijder, “Adaptive time stepping algorithm for lagrangian transport models: Theory and idealised test cases,” *Ocean Modelling*, vol. 68, pp. 9–21, 2013.
- [3] J. J. A. van Kooten, “Groundwater contaminant transport including adsorption and first order decay,” *Stochastic Hydrology and Hydraulics*, vol. 8, pp. 185–205, 1994.
- [4] G. J. M. Uffink, *Analysis of dispersion by the random walk method*. Technical University Delft. Thesis, 1990.
- [5] D. R. Lynch, D. A. Greenberg, A. Bilgili, D. J. McGillicuddy, jr., J. P. Manning, and A. L. Aretxabaleta, *Particles in the coastal ocean: Theory and applications*. New York: Cambridge University Press, 2013.

- [6] J. D. Wilson and B. L. Sawford, “Review of Lagrangian stochastic models for trajectories in the turbulent atmosphere,” in *Boundary-Layer Meteorology 25th Anniversary Volume, 1970–1995*, pp. 191–210, Dordrecht: Springer Netherlands, 1996.
- [7] I. A. Brovchenko and V. S. Maderich, “Numerical Lagrangian approach of oil propagation on the water surface modelling,” *Applied Hydromechanics*, vol. 4(76), no. 4, pp. 23–31, 2002.
- [8] R. Perianez and A. Elliott, “A particle-tracking method for simulating the dispersion of non-conservative radionuclides in coastal waters,” *Journal of Environmental Radioactivity*, vol. 58, no. 1, pp. 13–33, 2002.
- [9] I. O. Brovchenko and V. S. Maderich, “Three-dimensional Lagrangian model of multi-fractional sediments transport and its application to the simulation of gravitational currents,” *Applied Hydromechanics*, vol. 10(82), no. 2, pp. 3–12, 2008.
- [10] R. Perianez, I. Brovchenko, C. Duffa, K. T. Jung, T. Kobayashi, F. Lamego, V. Maderich, B. I. Min, H. Nies, I. Osvath, M. Psaltaki, and K. Suh, “A new comparison of marine dispersion model performances for fukushima releases in the frame of iaea modaria program,” *Journal of Environmental Radioactivity*, vol. 150, pp. 247–269, 2015.
- [11] A. Einstein and M. von Smoluchowski, *Brownian motion*. Moscow / Leningrad: ONTI, 1936.
- [12] E. van Sebille, S. M. Griffies, R. Abernathey, T. P. Adams, P. Berloff, A. Biastoch, B. Blanke, E. P. Chassignet, Y. Cheng, C. J. Cotter, E. Deleersnijder, K. Doos, H. F. Drake, S. Drijfhout, S. F. Gary, A. W. Heemink, J. Kjellsson, I. M. Koszalka, M. Lange, C. Lique, G. A. MacGilchrist, R. Marsh, C. G. M. Adame, R. McAdam, F. Nencioli, C. B. Paris, M. D. Piggott, J. A. Polton, S. Ru, S. H. A. M. Shah, M. D. Thomas, J. Wang, P. J. Wolfram, L. Zanna, and J. D. Zika, “Lagrangian ocean analysis: Fundamentals and practices,” *Ocean Modelling*, vol. 121, pp. 49–75, 2018.
- [13] J. R. Hunter, P. D. Craig, and H. E. Phillips, “On the use of random walk models with spatially variable diffusivity,” *Journal of Computational Physics*, vol. 106, no. 2, pp. 366–376, 1993.
- [14] A. W. Visser, “Using random walk models to simulate the vertical distribution of particles in a turbulent water column,” *Marine Ecology Progress Series*, vol. 158, pp. 275–281, 1997.
- [15] A. S. Monin and A. M. Yaglom, *Statistical Fluid Mechanics*, vol. 1, Mechanics of Turbulence. Cambridge, MA: MIT Press, 1975.
- [16] I. O. Brovchenko, *Numerical Lagrangian methods in the coastal hydrodynamics problems*. PhD thesis, Institute of Hydromechanics of NAS of Ukraine, Kyiv, 2017.
- [17] A. Bennett, *Lagrangian Fluid Mechanics*. New York: Cambridge University Press, 2006.

- [18] D. R. Lynch and K. W. Smith, “Lagrangian dispersion in sheared flow,” *Continental Shelf Research*, vol. 30, no. 20, pp. 2092–2105, 2010.

И. А. Бровченко, В. С. Мадерич, С. И. Ковалец

Метод случайных блужданий для неоднородных течений и диффузии

Физическое и математическое описание переноса пассивных примесей полем скорости в течении жидкости — адвекции — важно с точки зрения моделирования распространения загрязнений различной природы на поверхностях акваторий. В ряде случаев нельзя пренебрегать влиянием молекулярной диффузии на процесс адвекции. Данная статья посвящена разработке методов числового моделирования переноса пассивных частиц в полях неоднородных течений при наличии диффузии. Выяснено, что при решении уравнения переноса и диффузии методом случайных блужданий центр масс ансамбля частиц или математического ожидания положения каждой отдельной частицы не совпадает с линиями тока, построенными по векторному полю скорости. Показано, что при ненулевой второй производной от скорости по пространственной координате отклонение от линии тока имеет второй порядок малости. Выведены выражения для поправочных членов в уравнении движения пассивной частицы. Показано, что использование методов интегрирования траектории высокой точности в методах случайных блужданий может приводить к значительным погрешностям, связанным с дисперсией частицы в процессе движения. Установлено, что использование схем высокого порядка точности без учета поправочных членов вносит большую погрешность, чем применение схемы первого порядка точности. Выведены уравнения для моментов распределения положения частицы, связывающие дисперсию и математическое ожидание с неоднородным полем скорости и коэффициента диффузии. Они могут быть использованы при построении методов случайных блужданий высокой точности. Предложен подход, позволяющий строить численные схемы трехмерного переноса с учетом влияния дисперсии частиц на движение центра масс, а также влияния неоднородности поля течения на дисперсию распределения координат частиц. Справедливость выведенных уравнений проиллюстрирована аналитическими выкладками и численными расчетами на примерах двумерных задач.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: перенос, диффузия, стохастические методы, случайные блуждания

I. O. Brovchenko, V. S. Maderich, S. I. Kovalets

The method of random walks for inhomogeneous flows and diffusion

The physical and mathematical description of the transfer of passive impurities by the velocity field in the fluid flow (an advection) is important for modeling the spread of various pollutants on the surfaces of water areas. In some cases, one cannot neglect the influence of molecular diffusion on the advection process. This article is devoted to developing the methods of numerical modeling of the transfer of passive particles in the fields of inhomogeneous flows in the presence of diffusion. The center of mass of an ensemble of particles or the mathematical expectation of the position of each particle was found not to coincide with the streamlines constructed by the velocity vector field when solving the equation of transport and diffusion by the method of random walks. It is shown that with a non-zero second derivative of the velocity along the

spatial coordinate, the deviation from the streamline has the second order of smallness. Expressions for correction terms in the equation of motion of a passive particle are derived. The high-precision trajectory integration methods in random walk methods can lead to significant errors associated with particle dispersion during movement. The schemes of a high order of accuracy, without the allowance for the correction terms, introduce a greater error than the first-order schemes. The equation for the moments of the distribution of the particle's position is derived, which relates the dispersion and mathematical expectation to the inhomogeneous field of velocity and diffusion coefficient. They can be used for constructing high-precision random walk methods. The proposed approach allows building the numerical schemes of the three-dimensional transfer taking into account the influence of particle dispersion on the movement of the center of mass, as well as the influence of the inhomogeneity of the flow field on the dispersion of the particle coordinate distribution. The analytical statements and numerical calculations on examples of two-dimensional problems illustrate the validity of the derived equations.

KEY WORDS: advection, diffusion, stochastic methods, random walk