

УДК 512.312

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА РАСПРОСТРАНЕНИЯ ВРЕДНЫХ АЭРОЗОЛЬНЫХ ЧАСТИЦ В ПОГРАНИЧНОМ СЛОЕ АТМОСФЕРЫ

Равшанов Н.

д.т.н., заведующий лабораторией Центра разработки программных продуктов и аппаратно-программных комплексов при Ташкентском университете информационных технологий,
тел.: +(99871) 237-62-34, e-mail: ravshanzade-09@mail.ru

Мурадов Ф.

старший научный сотрудник-исследователь Центра разработки программных продуктов и аппаратно-программных комплексов при Ташкентском университете информационных технологий,
тел.: +(99897) 925-05-65, e-mail: farrux1981@umail.uz

Нарзуллаева Н.

преподаватель Самаркандского филиала Ташкентского университета информационных технологий,
тел.: + (99898) 573-88-86, e-mail: niga_cool89@mail.ru

Морзицин И.

магистрант Ташкентского университета информационных технологий,
тел.: +(99890) 904-01-99, e-mail: igor_23_1992@mail.uz

Рассматривается актуальность решения задачи мониторинга и прогнозирования экологического состояния промышленных регионов, где имеет место нарушение баланса санитарной нормы окружающей среды вследствие большого количества выбросов вредных мелкодисперсных активных аэрозольных частиц и углекислых газов в атмосферу. Приводится математическая модель процесса распространения загрязняющих веществ, выброшенных в окружающую среду из производственных объектов, которая описывается системой дифференциальных уравнений в частных производных с соответствующими начальными и краевыми условиями. В работе получено дифференциальное уравнение для расчета скорости осаждения мелкодисперсных и аэрозольных частиц, распространяющихся в приграничном слое атмосферы, когда учитываются основные параметры, воздействующие на скорость осаждения частиц: масса и радиус аэрозольных частиц, плотность атмосферы, сила сопротивления воздуха. Указаны основные параметры, которые играют существенную роль в процессе переноса и диффузии вредных веществ в атмосфере: скорость ветра и его направления; коэффициент поглощения вредных аэрозольных мелкодисперсных частиц в атмосфере и т.д. На основе реальных погодно-климатических факторов и с учетом орографии поверхности рассматриваемого региона проведены вычислительные эксперименты на ЭВМ, результаты которых приведены в виде двумерных и трехмерных графических объектов. Также приведены интерпретация результатов и выводы по проведенному исследованию в целом.

Ключевые слова: математическая модель, перенос и диффузия вредных веществ, погодно-климатический фактор, гидромеханика, численный алгоритм, программное средство, вычислительный эксперимент.

THE COMPUTER SIMULATION OF THE SPREAD OF HARMFUL AEROSOL PARTICLES IN THE ATMOSPHERIC BOUNDARY LAYER

Ravshanov N., Muradov F., Narzullaeva N., Morzitsin I.

In the article the urgency of solving the problem of monitoring and forecasting of the ecological state of industrial regions, where there is an imbalance of sanitary environmental regulations due to the large number of emissions of harmful active fine aerosol particles and carbon dioxide gases into the atmosphere. A mathematical model of the spread of pollutants released into the environment from production facilities which describes the system of differential equations in partial derivatives with appropriate initial and boundary conditions. We obtain the differential equation for calculating the rate of deposition of fine particulate and propagating in the boundary layer of the atmosphere, when considering the principal parameters affecting the rate of particle deposition the mass and radius of the aerosol particle density of the atmosphere, air resistance force. The article discusses the numerical solution of the problem of monitoring and forecasting of ecological state of industrial regions, where there is an imbalance of sanitary environmental regulations due to the large amount of harmful emissions of fine particulate matter, and carbon dioxide gas. Define the main parameters that play a significant role in the transport and diffusion of pollutants in the atmosphere: the wind speed and direction; absorption coefficient harmful aerosol of fine particles in the atmosphere,

etc. On the basis of the actual climatic factors and taking into account the orography of the region the surface of computational experiments conducted on a computer, the results of which are shown in the form of two-dimensional and three-dimensional graphics. It also includes the interpretation of the results and conclusions of research in general.

Keywords: mathematical model, transfer and diffusion of harmful substances, weather and climatic factor, fluid mechanics, numerical algorithm, the software, computational experiment.

ATMOSFERA CHEGARA QATLAMI ZARARLI PURKALADIGAN ZARRACHALAR TARQALISHI MODELASHTIRISH

Ravshanov N., Muradov F., Narzullayeva N., Morzitsin I.

Maqolada tufayli atmosferaga zararli faol nozik purkaladigan zarralar va karbonat gazlar chiqindilari katta raqamiga monitoring va sanitariya ekologik qoidalarga bir nomutanosiblik bor sanoat hududlarida, ekologik davlat prognozlash muammosini hal etish dolzarbligi. ifloslantiruvchi moddalar tarqalish A matematik model tegishli boshlang'ich va chegara shartlari bilan qisman sanab chiqing differensial tenglamalar tizimini ta'riflaydi ishlab chiqarish majmuida atrof-muhit qo'yib. Biz nozik zaharli birikmasini tezligini hisoblash va atmosferaning chegara qatlamida targ'ib uchun differensial tenglama olish, zarracha cho'kma kursi atmosfera, havo qarshilik kuch purkaladigan zarracha zichligi massasi va radiusi ta'sir asosiy parametrlarini hisobga qachon. maqola tufayli zararli nozik zaharli moddalar chiqindilarining va uglerod dioksid gaz katta miqdori monitoring va sanitariya ekologik qoidalarga bir nomutanosiblik bor sanoat hududlarida, ekologik davlat prognozlash muammosi soni hal muhokama. transport va diffuziya ifloslantiruvchi muhitida muhim rol o'ynaydi asosiy parametrlarini aniqlash: shamol tezligi va yo'nalishi; atmosfera va hokazo nozik zarrachalar yutilish koeffitsienti zararli purkaladigan Viloyat hisobga kompyuterda amalga oshirilgan hisoblash tajribalar sirtini orography olib dolzarb iqlimiy omillar asosida va natijalari ikki o'lchovli va uch o'lchovli grafik shaklida ko'rsatilgan. Bu, shuningdek, umuman, tadqiqot natijalari va xulosalari talqini o'z ichiga oladi.

Tayanch iboralar: matematik model, zararli moddalarning ko'chishi va diffuziyasi, ob-havo va iqlimga oid omillar, gidromexanika, sonli algoritim, dasturiy vosita, hisoblash tajribasi.

1. Введение

Вопросы мониторинга, прогнозирования и оценки загрязнения атмосферы и подстилающей поверхности земли пассивными и активными примесями, мелкодисперсными частицами и углекислыми газами, а также проектирования и размещения промышленных объектов с соблюдением предельно допустимых санитарных норм для промышленных регионов являются актуальной проблемой в охране окружающей среды.

Анализ состояния окружающей среды за последние годы показал, что большой рост выброса вредных веществ в атмосферу привел к дисбалансу экологического состояния регионов. Это особенно заметно в государствах, где с большим темпом растут промышленность и объекты производства, например, в Китае, России, Индии, США, Франции, Великобритании, Японии, Северной Корее, Малайзии и др.

Эти негативные последствия возникают за счет увеличения загазованности атмосферы и концентрации вредных мелкодисперсных частиц в указанных выше мегаполисах, и эти «негативные» эффекты отрицательно воздействуют на живую систему – флору и фауну региона, а на глобальном уровне вносят лепту в изменение климата земного шара.

Исходя из сказанного выше, вопросы мониторинга, прогнозирования и оценки загрязнения атмосферы и подстилающей поверхности земли пассивными и активными аэрозольными выбросами, а также мелкодисперсными примесями; размещения промышленных предприятий с соблюдением санитарных норм; определения количества взвешенных частиц над регионом и распространения

их в окружающую среду являются актуальными задачами по охране окружающей среды.

Надо отметить, что для комплексного исследования перечисленных задач необходимо создать эффективный инструмент, используя который, можно принять правильное управленческое решение по данной проблеме. Одними из универсальных, легко реализуемых инструментов для мониторинга и прогнозирования экологического состояния промышленных регионов являются математическая модель, численный алгоритм и программное средство, с помощью которых проводят вычислительные эксперименты на ЭВМ.

Математическим моделированием процессов переноса, диффузии и транспорта вредных веществ (углекислые газы, мелкодисперсные аэрозольные пассивные и активные частицы) занимаются в научных школах, созданных под руководством Г.И. Марчука, В.В. Пененко, А.Е. Алояна, Л.Т. Матвеева, В.П. Дымникова И.Э. Нааца, Э.А. Закарина, И.А. Кибеля, Л.Н. Гутмана, Ф.Б. Абуталиева, а также зарубежных ученых W.J. Layton, J.H. Ferziger, J.W. Deardorff, M. Germano, U. Piomelli, L.C. Berselli, G.S. Winckelmans, W.C. Reynolds, X. Зидиска, К.А. Велдса, К.И. Наппо, Ж. Готааса, М. Мюллиоланда, С. Трапа, М. Матисеса, В. Эдельмана и др.

Фундаментальные аспекты методологии математического моделирования процесса переноса и диффузии вредных мелкодисперсных частиц и углекислых газов в атмосфере сформулированы в работах М.Е. Берлянда, Е.Л. Гениховича, Р.И. Оникула, Н.Л. Бызовой, Ю.А. Анохиной, А.Х. Остромильского, Т. Iversen, Т.Е. Nordeng, R.Lange, М. Пекар, академика С.А. Солодкова и др.

Под руководством проф. Г.В. Аверина, А.А. Любимова, В.Ю. Волкова, Ю.Д. Эдельштейна, В.В.

Бугровского, А.М. Погорелова, А.В. Бизикина разработаны автоматизированные системы для экологического мониторинга и прогнозирования состояния окружающей среды.

В частности, в работе Н.В. Штырева [1] разработана гидродинамическая модель дальнего переноса загрязняющих веществ в атмосфере с учетом основных физических процессов в пограничном слое атмосферы. Разработанная математическая модель согласована с оперативной моделью среднесрочного прогноза Гидрометцентра РФ.

В работах [2-4] рассматривается процесс переноса загрязняющих веществ в атмосфере, и формулируются основные критерии опасности загрязнения атмосферы, а также определяется понятие предельно допустимой концентрации загрязняющего вещества в атмосферном воздухе промышленных регионов для важнейших видов загрязняющих веществ. В частности, в работах [5-7] разработаны математические модели и численные алгоритмы и их программное обеспечение для прогнозирования и мониторинга движения многокомпонентной воздушной среды и транспорта загрязняющих веществ в атмосфере, а также решена задача движения многокомпонентной воздушной среды в атмосфере с учетом парообразования и конденсации.

Работа [8] посвящена исследованию процесса переноса и диффузии активных аэрозольных частиц в атмосфере с учетом химических превращений в воздушной среде. Приведены химические реакции, происходящие с аэрозольными частицами в атмосфере.

В работе [9] исследованы процессы трансформации веществ при процессе переноса и диффузии вредных веществ в воздушной среде на большие и средние расстояния. Приведены методы и результаты измерений концентрации аэрозольных частиц в атмосфере, выбрасываемых из различных источников и участвующих в дальнем переносе. В работе также исследуются траекторные и эволюционные модели распространения аэрозольных частиц в атмосфере и сравниваются результаты расчетов с натурными измерениями.

Для описания физического процесса транспорта взвешенных частиц в атмосфере существует также ряд работ, в которых изложены различные подходы. К ним относятся методы исследования процесса с применением статистических моделей, основанных на функции распределения Гаусса [10-11].

Работа [12] посвящена разработке математической модели динамики и кинетики процесса переноса и диффузии газовых и аэрозольных примесей в атмосфере. В работе приведена модель переноса многокомпонентной примеси с учетом фотохимической трансформации и образования аэрозолей в тропосфере северного полушария с учетом кинетических процессов знуклеации, конденсации и коагуляции.

Математическое обеспечение процесса размещения пожароопасных объектов и их

оптимизации с учетом рельефа местности и пространственной формы приводится в работе [13].

В работе [14] разработана компьютерная модель для исследования, прогнозирования и мониторинга транспорта вредных веществ в окружающую среду автотранспортными средствами. Приведена численная реализация модели на ЭВМ с использованием метода контрольного объема на основе разработанного распределенного алгоритма расчета на ЭВМ.

Моделирование поля ветровых течений на основе системы уравнений Навье-Стокса с учетом сжимаемости и турбулентности воздушной среды, рельефа местности предложено в работе [15], а в качестве численного метода используется SIMPLE-алгоритм.

Подробный анализ приведенных работ показал, что при математическом моделировании и исследовании процесса распространения вредных веществ в атмосфере, во-первых, не рассмотрены изменения скорости осаждения аэрозольных частиц во времени и в зависимости от изменения скоростей воздушного потока воздуха, во-вторых, во всех приведенных математических моделях процесса коэффициенты поглощения аэрозольных частиц брались постоянными, в-третьих, предполагалось, что распространение вредных веществ, выброшенных из источников, не достигает рассматриваемых границ области решения задачи, и отсутствуют приток и отток вредных веществ через них.

В настоящей работе при исследовании процесса переноса и диффузии вредных веществ в атмосфере предприняты усилия для восполнения данных пробелов. Исходя из сказанного, целью настоящей работы является разработка математической модели и численного алгоритма решения задачи переноса и диффузии аэрозольных выбросов в пограничном слое атмосферы.

2. Постановка задачи

Для исследования процесса переноса и диффузии аэрозольных частиц в атмосфере с учетом существенного параметра – скорости осаждения мелкодисперсных частиц w_g – рассмотрим математическую модель, описывающуюся на основе закона гидромеханики с помощью многомерного дифференциального уравнения в частных производных [16-18]:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + u \cdot \frac{\partial \theta}{\partial x} + (w - w_g) \cdot \frac{\partial \theta}{\partial z} + \sigma \cdot \theta = \mu \cdot \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \cdot \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) + \delta_{ij} Q; \quad (1)$$

$$\frac{\partial w_g}{\partial t} = \frac{m \cdot g - 6 \cdot \pi \cdot k \cdot r \cdot w_g - 0,5 \cdot c \cdot \rho \cdot s \cdot w_g^2}{m} \quad (2)$$

с соответствующими начальными и граничными условиями:

$$\theta(x, z, t)|_{t=0} = \theta^0(x, z); w_g(0)|_{t=0} = w_g^0; \quad (3)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} \Big|_{x=0} = \mu(\theta_t - \theta); \quad \frac{\partial \theta}{\partial x} \Big|_{x=Lx} = \mu(\theta_t - \theta); \quad (4)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} \Big|_{z=0} = \beta \cdot \theta - f_0(x); \quad \frac{\partial \theta}{\partial z} \Big|_{z=H_z} = 0. \quad (5)$$

Здесь θ - концентрация вредных веществ в атмосфере; θ_0 - первичная концентрация вредных веществ в атмосфере; x, y, z - система координат; u, v, w - скорость ветра по трем направлениям; w_g - скорость осаждения частиц; σ - коэффициент поглощения вредных веществ в атмосфере; μ, λ - коэффициенты диффузии и турбулентности; Q - мощность источника; $\delta_{i,j}$ - функция Дирака; f_0 - источник выброса вредных веществ в атмосферу; c - безразмерная величина, равная 0,5; ρ - плотность атмосферы; r - радиус частиц; S - площадь поперечного сечения частиц; g - ускорение силы тяжести.

3. Метод решения задачи

Так как задача (1) - (5) описывается многомерным нелинейным дифференциальным уравнением в частных производных с соответствующими начальными и краевыми условиями, получить ее решение в аналитической форме затруднительно. Для решения задачи используем неявную конечно-разностную схему по времени со вторым порядком точности по времени и получаем [18-20]: при $(w-wg) < 0$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \cdot \frac{\theta_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - \theta_{i,j}^n}{\Delta t / 2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{\theta_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} - \theta_{i+1,j}^n}{\Delta t / 2} + \\ & + \frac{1}{2} \cdot u \cdot \frac{\theta_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - \theta_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} + \frac{1}{2} \cdot u \cdot \frac{\theta_{i,j}^n - \theta_{i-1,j}^n}{\Delta x} + \\ & + (w - w_g) \cdot \frac{\theta_{i,j+1}^n - \theta_{i,j}^n}{\Delta z} + \sigma \cdot \theta_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} = \\ & = \frac{\mu}{\Delta x^2} \cdot \left(\theta_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} - 2 \cdot \theta_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + \theta_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}} \right) + \\ & + \frac{1}{\Delta z^2} \left(k_{i,j+0,5} \cdot \theta_{i,j+1}^n - (k_{i,j+0,5} + k_{i,j-0,5}) \cdot \theta_{i,j}^n + k_{i,j-0,5} \cdot \theta_{i,j-1}^n \right) + \frac{1}{2} \cdot Q_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}, \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta t} \cdot \theta_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - \frac{1}{\Delta t} \cdot \theta_{i,j}^n + \frac{1}{\Delta t} \cdot \theta_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} - \\ & - \frac{1}{\Delta t} \cdot \theta_{i+1,j}^n + \frac{u}{2 \cdot \Delta x} \cdot \theta_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - \frac{u}{2 \cdot \Delta x} \cdot \theta_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}} + \\ & + \frac{u}{2 \cdot \Delta x} \cdot \theta_{i,j}^n - \frac{u}{2 \cdot \Delta x} \cdot \theta_{i-1,j}^n + \frac{w-w_g}{\Delta z} \cdot \theta_{i,j+1}^n - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & - \frac{w-w_g}{\Delta z} \cdot \theta_{i,j}^n + \sigma \cdot \theta_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} = \\ & = \frac{\mu}{\Delta x^2} \cdot \theta_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} - \frac{2 \cdot \mu}{\Delta x^2} \cdot \theta_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + \\ & + \frac{\mu}{\Delta x^2} \cdot \theta_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{k_{i,j+0,5}}{\Delta z^2} \cdot \theta_{i,j+1}^n - \\ & - \frac{k_{i,j+0,5} + k_{i,j-0,5}}{\Delta z^2} \cdot \theta_{i,j}^n + \\ & \frac{k_{i,j-0,5}}{\Delta z^2} \cdot \theta_{i,j-1}^n + \frac{1}{2} \cdot Q_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (6)$$

Группируя члены уравнения (6), получаем

$$\begin{aligned} & - \left(\frac{u}{2 \cdot \Delta x} + \frac{\mu}{\Delta x^2} \right) \cdot \theta_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}} + \\ & + \left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{u}{2 \cdot \Delta x} + \sigma + \frac{2 \cdot \mu}{\Delta x^2} \right) \cdot \theta_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - \\ & - \left(\frac{\mu}{\Delta x^2} - \frac{1}{\Delta t} \right) \cdot \theta_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} = \\ & = \frac{u}{2 \cdot \Delta x} \cdot \theta_{i-1,j}^n + \\ & + \left(\frac{1}{\Delta t} - \frac{u}{2 \cdot \Delta x} + \frac{w-w_g}{\Delta z} - \frac{k_{i,j-0,5} + k_{i,j+0,5}}{\Delta z^2} \right) \cdot \theta_{i,j}^n - \\ & - \frac{1}{\Delta t} \cdot \theta_{i+1,j}^n + \frac{k_{i,j-0,5}}{\Delta z^2} \cdot \theta_{i,j-1}^n + \\ & + \left(\frac{k_{i,j+0,5}}{\Delta z^2} - \frac{w-w_g}{\Delta z} \right) \cdot \theta_{i,j+1}^n + \frac{1}{2} \cdot Q_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (7)$$

Умножая обе стороны уравнения (7) на (-1), получаем

$$\begin{aligned} & \left(\frac{u}{2 \cdot \Delta x} + \frac{\mu}{\Delta x^2} \right) \cdot \theta_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}} - \\ & - \left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{u}{2 \cdot \Delta x} + \sigma + \frac{2 \cdot \mu}{\Delta x^2} \right) \cdot \theta_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + \left(\frac{\mu}{\Delta x^2} - \frac{1}{\Delta t} \right) \cdot \theta_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} = \\ & = - \left(\frac{u}{2 \cdot \Delta x} \cdot \theta_{i-1,j}^n + \left(\frac{1}{\Delta t} - \frac{u}{2 \cdot \Delta x} + \frac{w-w_g}{\Delta z} - \frac{k_{i,j-0,5} + k_{i,j+0,5}}{\Delta z^2} \right) \times \right. \\ & \quad \times \theta_{i,j}^n - \frac{1}{\Delta t} \cdot \theta_{i+1,j}^n + \\ & \quad \left. + \frac{k_{i,j-0,5}}{\Delta z^2} \cdot \theta_{i,j-1}^n + \left(\frac{k_{i,j+0,5}}{\Delta z^2} - \frac{w-w_g}{\Delta z} \right) \cdot \theta_{i,j+1}^n + \frac{1}{2} \cdot Q_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} \right). \end{aligned} \quad (8)$$

Далее, группируя схожие члены уравнения (8), в конечном итоге получаем

$$a_{i,j} \cdot \theta_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}} - b_{i,j} \cdot \theta_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + c_{i,j} \cdot \theta_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} = -d_{i,j}.$$

Здесь

$$a_{i,j} = \frac{u}{2 \cdot \Delta x} + \frac{\mu}{\Delta x^2}; \quad b_{i,j} = \frac{1}{\Delta t} + \frac{u}{2 \cdot \Delta x} + \sigma + \frac{2 \cdot \mu}{\Delta x^2};$$

$$c_{i,j} = \frac{\mu}{\Delta x^2} - \frac{1}{\Delta t};$$

$$d_{i,j} = \frac{u}{2 \cdot \Delta x} \cdot \theta_{i-1,j}^n +$$

$$+ \left(\frac{1}{\Delta t} - \frac{u}{2 \cdot \Delta x} + \frac{w-w_g}{\Delta z} - \frac{k_{i,j-0,5} + k_{i,j+0,5}}{\Delta z^2} \right) \cdot \theta_{i,j}^n -$$

$$- \frac{1}{\Delta t} \cdot \theta_{i+1,j}^n + \frac{k_{i,j-0,5}}{\Delta z^2} \cdot \theta_{i,j-1}^n +$$

$$\left(\frac{k_{i,j+0,5}}{\Delta z^2} - \frac{w-w_g}{\Delta z} \right) \cdot \theta_{i,j+1}^n + \frac{1}{2} Q_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}.$$

Аналогично при $(w-w_g) > 0$ аппроксимируем дифференциальные операторы на конечно-разностные и получаем

$$\frac{1}{2} \cdot \frac{\theta_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - \theta_{i,j}^n}{\Delta t / 2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{\theta_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} - \theta_{i+1,j}^n}{\Delta t / 2} +$$

$$+ \frac{1}{2} \cdot u \cdot \frac{\theta_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - \theta_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} + \frac{1}{2} \cdot u \cdot \frac{\theta_{i,j}^n - \theta_{i-1,j}^n}{\Delta x} +$$

$$+ (w-w_g) \cdot \frac{\theta_{i,j}^n - \theta_{i,j-1}^n}{\Delta z} + \sigma \cdot \theta_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} =$$

$$= \frac{\mu}{\Delta x^2} \cdot \left(\theta_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} - 2 \cdot \theta_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + \theta_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}} \right) +$$

$$+ \frac{1}{\Delta z^2} (k_{i,j+0,5} \cdot \theta_{i,j+1}^n -$$

$$- (k_{i,j+0,5} + k_{i,j-0,5}) \cdot \theta_{i,j}^n + k_{i,j-0,5} \cdot \theta_{i,j-1}^n) +$$

$$+ \frac{1}{2} \cdot Q_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}.$$

Для вычисления значения искомой функции (концентрация взвешенных частиц в атмосфере) для целого шага по времени аналогично при $(w-w_g) < 0$ получаем

$$\frac{1}{2} \cdot \frac{\theta_{i,j}^{n+1} - \theta_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t / 2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{\theta_{i,j+1}^{n+1} - \theta_{i,j+1}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t / 2} +$$

$$u \cdot \frac{\theta_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - \theta_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} + \frac{w-w_g}{2} \cdot \frac{\theta_{i,j+1}^{n+1} - \theta_{i,j}^{n+1}}{\Delta z} +$$

$$+ \frac{w-w_g}{2} \cdot \frac{\theta_{i,j+1}^{n+\frac{1}{2}} - \theta_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta z} +$$

$$+ \sigma \cdot \theta_{i,j}^{n+1} = \frac{\mu}{\Delta x^2} \cdot \left(\theta_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} - 2 \cdot \theta_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + \theta_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}} \right) + \quad (9)$$

$$+ \frac{1}{\Delta z^2} (k_{i,j+0,5} \cdot \theta_{i,j+1}^{n+1} -$$

$$- (k_{i,j+0,5} + k_{i,j-0,5}) \cdot \theta_{i,j}^{n+1} + k_{i,j-0,5} \cdot \theta_{i,j-1}^{n+1}) +$$

$$+ \frac{1}{2} \cdot Q_{i,j}^{n+1},$$

и, группируя схожие члены уравнения (9), в конечном итоге имеем

$$\bar{a}_{i,j} \cdot \theta_{i,j-1}^{n+1} - \bar{b}_{i,j} \cdot \theta_{i,j}^{n+1} + \bar{c}_{i,j} \cdot \theta_{i,j+1}^{n+1} = -\bar{d}_{i,j}, \quad (13)$$

где

$$\bar{a}_{i,j} = \frac{k_{i,j-0,5}}{\Delta z^2};$$

$$\bar{b}_{i,j} = \frac{1}{\Delta t} - \frac{w-w_g}{2 \cdot \Delta z} + \sigma + \frac{k_{i,j-0,5} + k_{i,j+0,5}}{\Delta z^2};$$

$$\bar{c}_{i,j} = \frac{k_{i,j+0,5}}{\Delta z^2} - \frac{1}{\Delta t} - \frac{w-w_g}{2 \cdot \Delta z};$$

$$\bar{d}_{i,j} = \left(\frac{u}{\Delta x} + \frac{\mu}{\Delta x^2} \right) \cdot \theta_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}} +$$

$$+ \left(\frac{1}{\Delta t} - \frac{u}{\Delta x} + \frac{w-w_g}{2 \cdot \Delta z} - \frac{2 \cdot \mu}{\Delta x^2} \right) \cdot \theta_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} +$$

$$+ \frac{1}{\Delta t} \cdot \theta_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} + \left(\frac{1}{\Delta t} - \frac{w-w_g}{2 \cdot \Delta z} \right) \cdot \theta_{i,j+1}^{n+\frac{1}{2}} +$$

$$+ \frac{1}{2} Q_{i,j}^{n+1},$$

при $(w-w_g) > 0$

$$\bar{a}_{i,j} = \frac{w-w_g}{2 \cdot \Delta z} - \frac{k_{i,j-0,5}}{\Delta z^2};$$

$$\bar{b}_{i,j} = \frac{1}{\Delta t} + \frac{w-w_g}{2 \cdot \Delta z} + \sigma + \frac{k_{i,j-0,5} + k_{i,j+0,5}}{\Delta z^2};$$

$$\bar{c}_{i,j} = \frac{k_{i,j+0,5}}{\Delta z^2} - \frac{1}{\Delta t};$$

$$\bar{d}_{i,j} = \left(\frac{u}{\Delta x} + \frac{\mu}{\Delta x^2} \right) \cdot \theta_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}} +$$

$$+ \left(\frac{1}{\Delta t} - \frac{u}{\Delta x} - \frac{w-w_g}{2 \cdot \Delta z} - \frac{2 \cdot \mu}{\Delta x^2} \right) \cdot \theta_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} +$$

$$+ \frac{\mu}{\Delta x^2} \cdot \theta_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{\Delta t} \cdot \theta_{i,j+1}^{n+\frac{1}{2}} +$$

$$\frac{w-w_g}{2 \cdot \Delta z} \cdot \theta_{i,j-1}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} Q_{i,j}^{n+1}.$$

Для численного решения задачи заменяем краевое условие

$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial x} \right|_{x=0} = \mu(\theta_t - \theta)$$

на конечно-разностное со вторым порядком точности и получаем

$$\frac{-3 \cdot \theta_{0,j} + 4 \cdot \theta_{1,j} - \theta_{2,j}}{2 \cdot \Delta x} = \mu \cdot (\theta_t - \theta_0);$$

$$-3 \cdot \theta_{0,j} + 4 \cdot \theta_{1,j} - \theta_{2,j} = 2 \cdot \mu \cdot \Delta \cdot \theta_t - 2 \cdot \mu \cdot \Delta \cdot \theta_{0,j},$$

где прогоночные коэффициенты вычисляются следующим образом:

$$\theta_{0,j} = \frac{b_{1,j} - 4 \cdot c_{1,j}}{a_{1,j} + 2 \cdot \mu \cdot \Delta x \cdot c_{1,j} - 3 \cdot c_{1,j}} \cdot \theta_{1,j} +$$

$$+ \frac{2 \cdot \mu \cdot \Delta x \cdot \theta_t \cdot c_{1,j} - d_{1,j}}{a_{1,j} + 2 \cdot \mu \cdot \Delta x \cdot c_{1,j} - 3 \cdot c_{1,j}};$$

отсюда

$$\alpha_{0,j} = \frac{b_{1,j} - 4 \cdot c_{1,j}}{a_{1,j} + 2 \cdot \mu \cdot \Delta x \cdot c_{1,j} - 3 \cdot c_{1,j}};$$

$$\beta_{0,j} = \frac{2 \cdot \mu \cdot \Delta x \cdot \theta_t \cdot c_{1,j} - d_{1,j}}{a_{1,j} + 2 \cdot \mu \cdot \Delta x \cdot c_{1,j} - 3 \cdot c_{1,j}}.$$

Так же краевое условие

$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial x} \right|_{x=Lx} = \mu(\theta_t - \theta)$$

заменяя на разностное, получаем

$$\frac{\theta_{N-2,j} - 4 \cdot \theta_{N-1,j} + 3 \cdot \theta_{N,j}}{2 \cdot \Delta x} = \mu \cdot \theta_t - \mu \cdot \theta_{N,j},$$

где можно вычислить

$$\theta_{N,j} = \frac{2 \cdot \Delta x \cdot \mu \cdot \theta_t - \beta_{N-2,j} - \alpha_{N-2,j} \cdot \beta_{N-1,j} + 4 \cdot \beta_{N-1,j}}{\alpha_{N-2,j} \cdot \alpha_{N-1,j} - 4 \cdot \alpha_{N-1,j} + 2 \cdot \Delta x \cdot \mu + 3} = \frac{2 \cdot \Delta x \cdot \mu \cdot \theta_t - \beta_{N-2,j} - (\alpha_{N-2,j} - 4) \cdot \beta_{N-1,j}}{2 \cdot \Delta x \cdot \mu + 3 + (\alpha_{N-2,j} - 4) \cdot \alpha_{N-1,j}}.$$

Указанную выше процедуру, применяя для краевых условий

$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial z} \right|_{z=0} = \beta \cdot \theta - f_0(x); \quad \left. \frac{\partial \theta}{\partial z} \right|_{z=H} = 0,$$

окончательно получаем

$$\bar{\alpha}_{i,0} = \frac{\bar{b}_{i,1} - 4 \cdot \bar{c}_{i,1}}{\bar{a}_{i,1} - 2 \cdot \beta \cdot \Delta z \cdot \bar{c}_{i,1} - 3 \cdot \bar{c}_{i,1}};$$

$$\bar{\beta}_{i,0} = \frac{\bar{d}_{i,1} - 2 \cdot f \cdot \Delta z \cdot \bar{c}_{i,1}}{\bar{a}_{i,1} - 2 \cdot \beta \cdot \Delta z \cdot \bar{c}_{i,1} - 3 \cdot \bar{c}_{i,1}};$$

$$\bar{\theta}_{i,M} = \frac{4 \cdot \bar{\beta}_{i,M-1} - \bar{\alpha}_{i,M-2} \cdot \bar{\beta}_{i,M-1} - \bar{\beta}_{i,M-2}}{\bar{\alpha}_{i,M-2} \cdot \bar{\alpha}_{i,M-1} - 4 \cdot \bar{\alpha}_{i,M-1} + 3} = \frac{(4 - \bar{\alpha}_{i,M-2}) \cdot \bar{\beta}_{i,M-1} - \bar{\beta}_{i,M-2}}{(\bar{\alpha}_{i,M-2} - 4) \cdot \bar{\alpha}_{i,M-1} + 3}.$$

Для решения поставленной задачи (1) - (5), линеаризуя уравнения (2), заменяем на конечно-разностные и получаем уравнение для вычисления

промежуточного результата по $w_g^{n+\frac{1}{2}}$:

$$\frac{w_g^{n+\frac{1}{2}} - w_g^n}{\Delta t} = \frac{m \cdot g - 6 \cdot \pi \cdot k \cdot r \cdot w_g^{n+\frac{1}{2}} - 0,5 \cdot c \cdot \rho \cdot s \cdot \left(2 \cdot \tilde{w}_g \cdot w_g^{n+\frac{1}{2}} - \tilde{w}_g^2 \right)}{m};$$

$$\left(m + 6 \cdot \pi \cdot k \cdot r \cdot \Delta t + c \cdot \rho \cdot s \cdot \Delta t \cdot \tilde{w}_g \right) \cdot w_g^{n+\frac{1}{2}} = m \cdot w_g^n + m \cdot g \cdot \Delta t + 0,5 \cdot c \cdot \rho \cdot s \cdot \Delta t \cdot \tilde{w}_g^2;$$

$$w_g^{n+\frac{1}{2}} = \frac{m}{m + 6 \cdot \pi \cdot k \cdot r \cdot \Delta t + c \cdot \rho \cdot s \cdot \Delta t \cdot \tilde{w}_g} \cdot w_g^n +$$

$$+ \frac{m \cdot g \cdot \Delta t + 0,5 \cdot c \cdot \rho \cdot s \cdot \Delta t \cdot \tilde{w}_g^2}{m + 6 \cdot \pi \cdot k \cdot r \cdot \Delta t + c \cdot \rho \cdot s \cdot \Delta t \cdot \tilde{w}_g}.$$

Для вычисления w_g^{n+1} получаем следующее соотношение:

$$\frac{w_g^{n+1} - w_g^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t} = \frac{m \cdot g - 6 \cdot \pi \cdot k \cdot r \cdot w_g^{n+1} - 0,5 \cdot c \cdot \rho \cdot s \cdot \left(2 \cdot \tilde{w}_g \cdot w_g^{n+1} - \tilde{w}_g^2 \right)}{m};$$

$$m \cdot w_g^{n+1} - m \cdot w_g^{n+\frac{1}{2}} = m \cdot g \cdot \Delta t - 6 \cdot \pi \cdot k \cdot r \cdot \Delta t \cdot w_g^{n+1} - c \cdot \rho \cdot s \cdot \Delta t \cdot \tilde{w}_g \cdot w_g^{n+1} + 0,5 \cdot c \cdot \rho \cdot s \cdot \Delta t \cdot \tilde{w}_g^2;$$

$$\left(m + 6 \cdot \pi \cdot k \cdot r \cdot \Delta t + c \cdot \rho \cdot s \cdot \Delta t \cdot \tilde{w}_g \right) \cdot w_g^{n+1} = m \cdot w_g^{n+\frac{1}{2}} + m \cdot g \cdot \Delta t + 0,5 \cdot c \cdot \rho \cdot s \cdot \Delta t \cdot \tilde{w}_g^2;$$

$$w_g^{n+1} = \frac{m}{m + 6 \cdot \pi \cdot k \cdot r \cdot \Delta t + c \cdot \rho \cdot s \cdot \Delta t \cdot \tilde{w}_g} \cdot w_g^{n+\frac{1}{2}} + \frac{m \cdot g \cdot \Delta t + 0,5 \cdot c \cdot \rho \cdot s \cdot \Delta t \cdot \tilde{w}_g^2}{m + 6 \cdot \pi \cdot k \cdot r \cdot \Delta t + c \cdot \rho \cdot s \cdot \Delta t \cdot \tilde{w}_g}.$$

Полученное нелинейное уравнение (2) решено методом простой итерации. Сходимость итерационного процесса проверяется с помощью условия $|w_g^{s+1} - w_g^s| < \varepsilon$, где ε - точность итерационного процесса, s - число итераций.

Здесь надо отметить, что для численного решения уравнения (2) необходимо задать начальное условие и начальное итерационное значение для $w_g(0)$, w_g^s . Задание значений для этих переменных зависит от стратификации воздушной массы атмосферы: при устойчивой стратификации

$$w_g(0) = \frac{d^2 g(\rho - \rho_z)}{18k}; \quad w_g^s = \frac{d^2 g(\rho - \rho_z)}{18k};$$

при безразличной стратификации

$$w_g(0) = c_1 \frac{d^{1.14}(\rho - \rho_z)^{0.714}}{\rho_z^{0.286} k^{0.43}};$$

$$w_g^s = c_1 \frac{d^{1.14}(\rho - \rho_z)^{0.714}}{\rho_z^{0.286} k^{0.43}};$$

при неустойчивой стратификации

$$w_g(0) = 5.46 \sqrt{\frac{d(\rho - \rho_z)}{\rho_z}};$$

$$w_g^s = 5.46 \sqrt{\frac{d(\rho - \rho_z)}{\rho_z}}.$$

Здесь ρ_z - плотность частиц; $c_1 = 0,78$.

4. Вычислительный эксперимент (ВЭ) и обсуждение результатов

На основе разработанного численного алгоритма составлено программное средство в среде

Embarcadero RAD Studio 10 Seattle C++ Builder и проведены ВЭ на ЭВМ. Результаты ВЭ приведены в виде графических 2-х и 3-мерных объектов (рис. 1- 8).

Согласно результатам проведенных численных расчетов на ВЭМ (рис.1, 3-5), с ростом горизонтальной скорости воздушной массы атмосферы концентрация вредных веществ в приземном слое растет. Это особенно заметно при скорости ветра $u \geq 2,5$ м/с.

Одним из существенных параметров, воздействующих на распределение концентрации

вредных аэрозольных частиц в атмосфере, является коэффициент поглощения вредных веществ в атмосфере σ . Коэффициент поглощения вредных частиц зависит от состояния воздушной массы атмосферы, и он изменяется в течение суток и времени года. В зависимости от этого параметра изменяется концентрация аэрозольных частиц в атмосфере (рис.2). С ростом значения σ уменьшается концентрация вредных веществ в приземном слое атмосферы. Проведенные численные расчеты показали, что при влажном воздухе от 70 до 80% вредные вещества поглощаются в атмосфере.

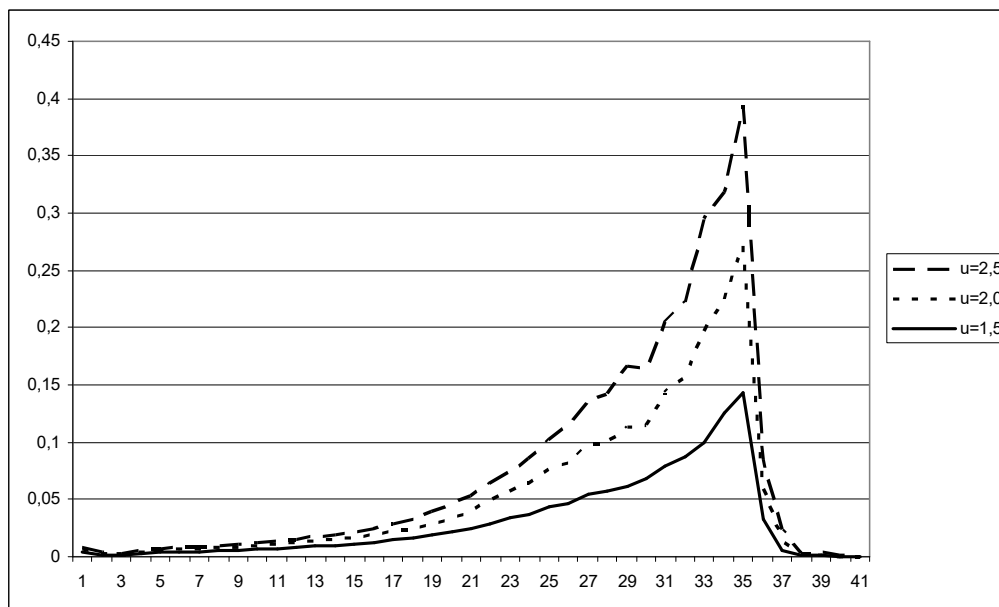


Рис. 1. Изменение концентрации вредных веществ в атмосфере в зависимости от горизонтальной скорости воздушной массы атмосферы

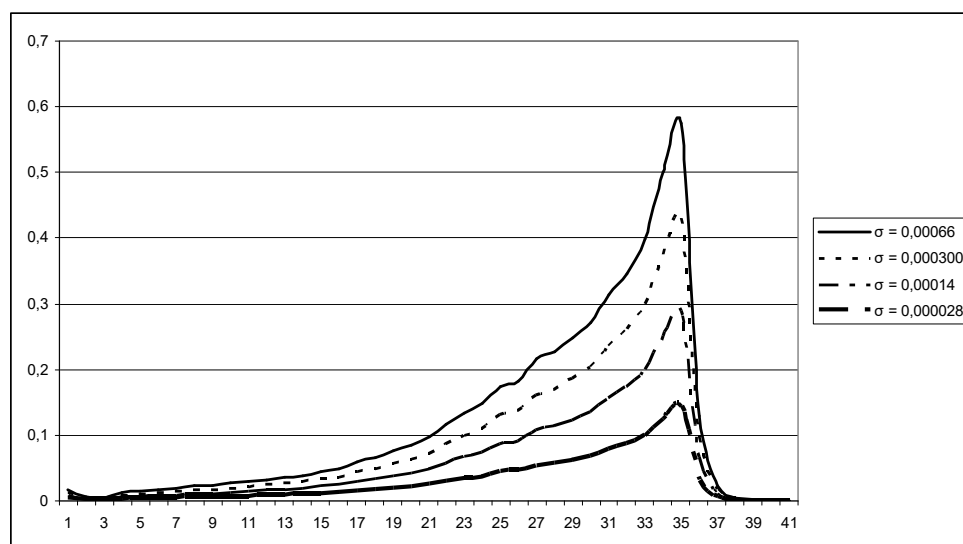


Рис. 2. Изменение концентрации вредных веществ в атмосфере в зависимости от коэффициента поглощения вредных веществ

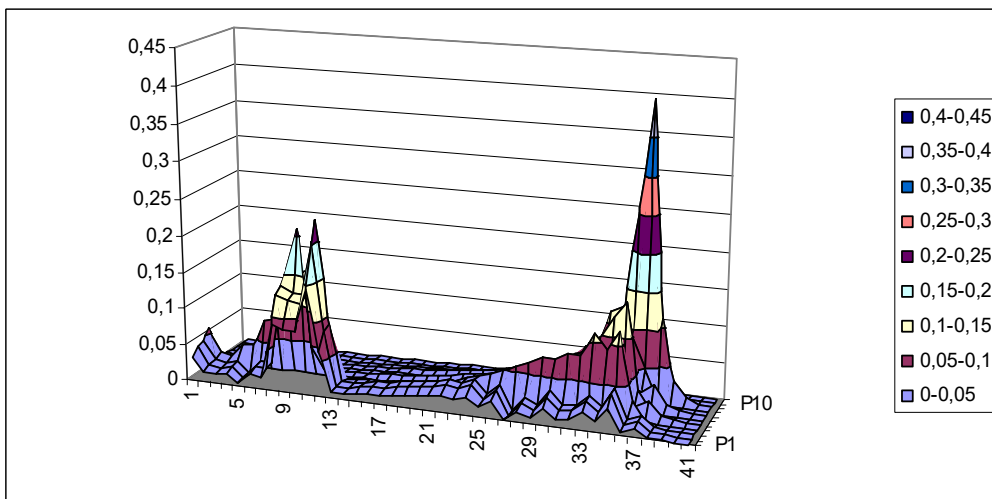


Рис.3. Изменение концентрации вредных веществ в атмосфере при $u=1,5$ м/с

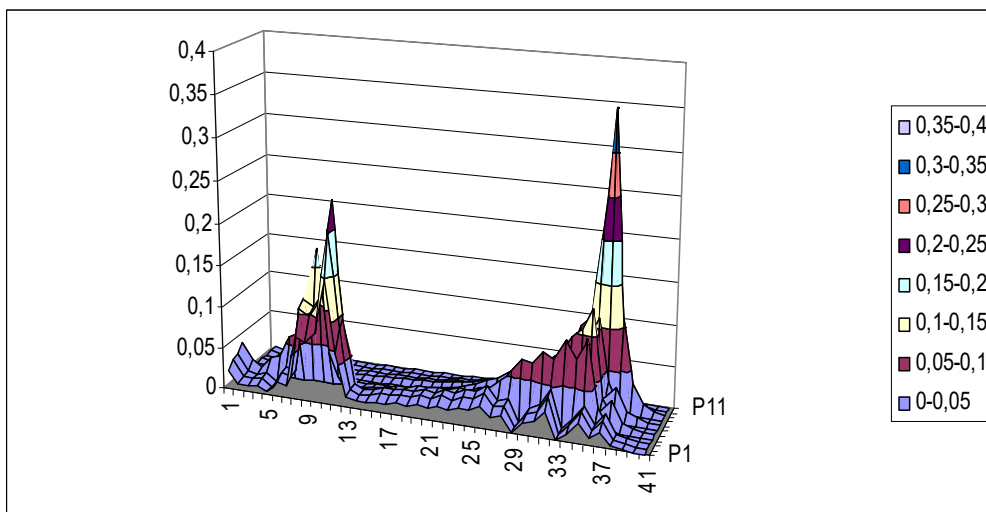


Рис.4. Изменение концентрации вредных веществ в атмосфере при $u=2,0$ м/с

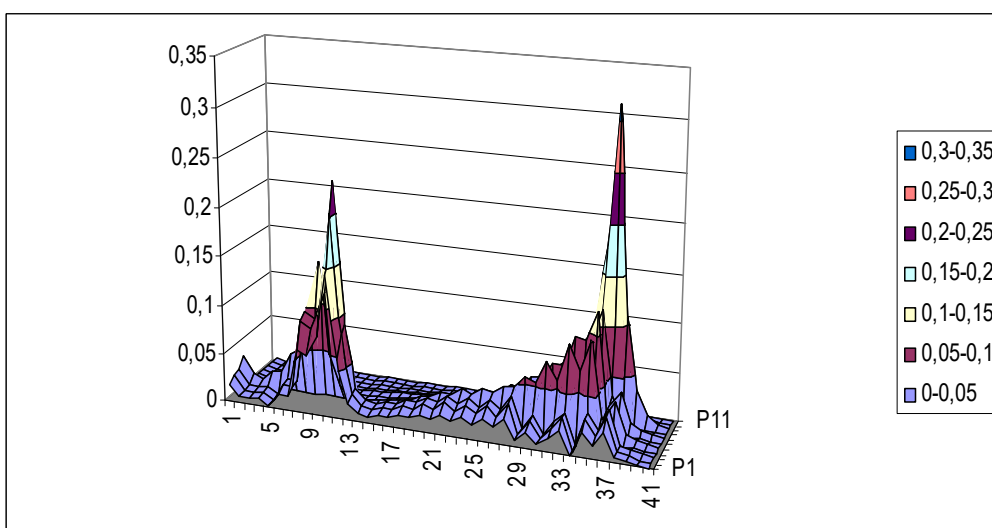


Рис.5. Изменение концентрации вредных веществ в атмосфере при $u=2,5$ м/с

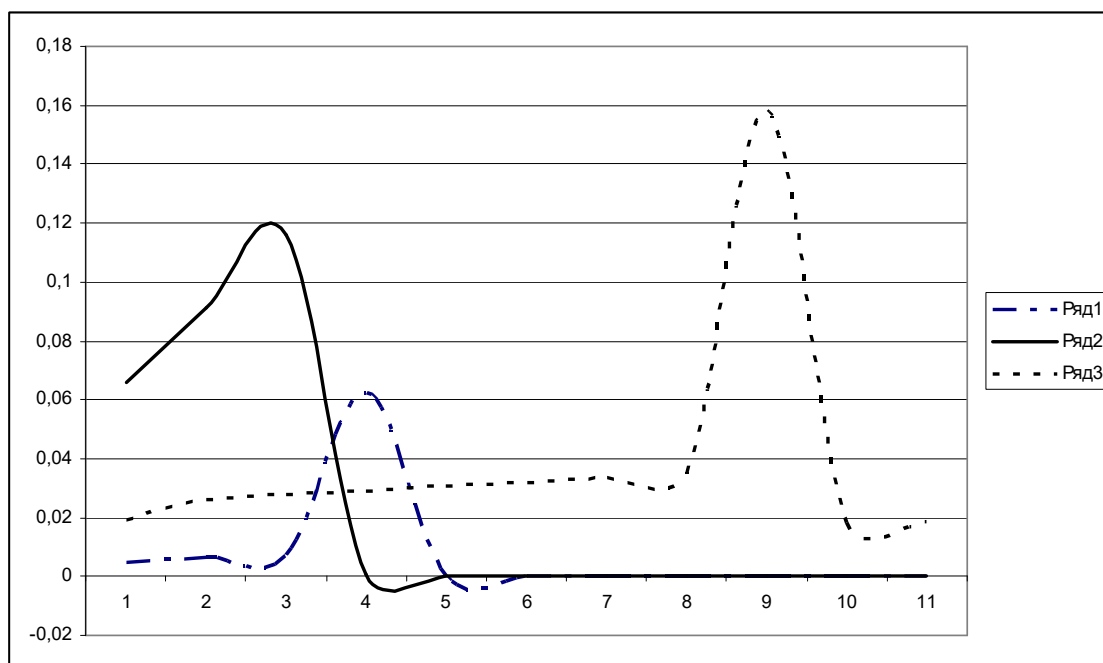


Рис.6. Изменение концентрации вредных веществ по высоте слоя атмосферы (при наличии трех источников выброса вредных веществ, $t = 0.5$ ч)

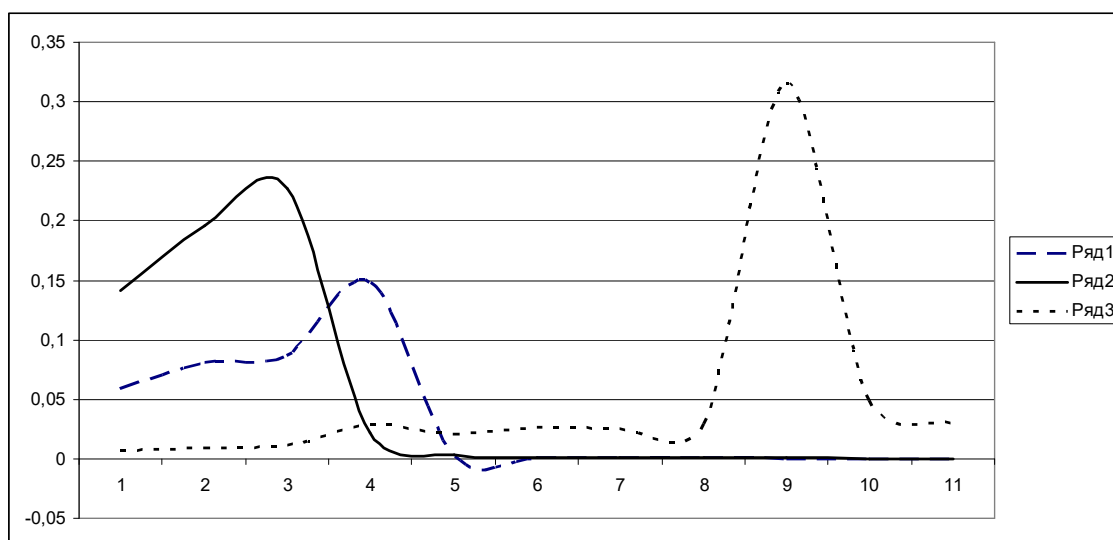


Рис.7. Изменение концентрации вредных веществ по высоте слоя атмосферы (при наличии трех источников выброса вредных веществ, $t = 7,30$ ч)

5. Выводы

ВЭ проведены при наличии одного, двух и трех источников с различными мощностями (рис. 6-7). Как видно из кривых рис. 6-7, концентрация вредных веществ в атмосфере со временем растет.

Анализ проведенных численных расчетов показал, что изменение концентрации аэрозольных частиц в атмосфере по времени зависит, во-первых, от числа источников; во-вторых, от значения коэффициента поглощения аэрозольных частиц, который изменяется в зависимости от влажности воздушной массы атмосферы; в-третьих, от скорости осаждения частиц по вертикали w_g .

ВЭ установлено, что на процесс горизонтального переноса аэрозольных частиц в приземном слое

атмосферы существенно воздействуют горизонтальные скорости перемещения воздушной массы атмосферы.

Проведенными численными расчетами установлено, что вредные вещества от 70 до 80% поглощаются в атмосфере, когда воздушная масса насыщена до 90% и более влагой и коэффициент поглощения принимает максимальное значение.

Согласно проведенным ВЭ, на санитарные нормы атмосферы региона существенно воздействуют следующие параметры: скорость воздушной массы атмосферы, коэффициент поглощения вредных веществ в атмосфере, число функционирующих источников и их мощности и координаты, физико-механические свойства аэрозольных частиц, а также их линейные размеры.

Литература

- [1] *Штырева Н.В.* Численная модель дальнего переноса загрязняющих веществ в атмосфере, реализованная на суперЭВМ CRAY Y-Y-MP8E // Труды Гидрометцентра РФ. – 2000. – Вып. 334. – С. 121-129.
- [2] *Iversen T., Nordeng T.E.* A numerical model suitable for the simulation of a broad class of circulation systems on the atmospheric mesoscale // Norwegian Institute for Air Research Techn. Rep. – 2001. – № 2. – Pp. 38-51.
- [3] *Lange R.* ADPIC - A three-dimensional particle-in-cell model for the dispersal of atmospheric pollutants and its comparison to regional tracer studies // Journal Applied Meteorology. – 1978. – Vol. 17. – Pp. 320-329.
- [4] *Peкар M.* Regional model LPMOD and ASIMD. Algorithms, parameterization and results of application to PB and CD in Europe scale for 1990 : ЕМЕР/МСС-Е Report 9/96. – Moscow, 1996. – 78 p.
- [5] *Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Хачуни Д.С.* Математическое моделирование движения многокомпонентной воздушной среды и транспорта загрязняющих веществ // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2011. – № 8 (121). – С 73-79.
- [6] *Сухинов А.И., Хачуни Д.С.* Программная реализация двумерной задачи движения воздушной среды // Известия Южного федерального университета. Технические науки. – 2013. – № 4. – С. 15-20.
- [7] *Чистяков А.Е., Хачуни Д.С.* Задача движения многокомпонентной воздушной среды с учетом парообразования и конденсации // Известия Южного федерального университета. Технические науки. – 2013. – № 4. – С. 87-98.
- [8] *Израэль Ю.А., Назаров И.М., Прессман А.Я., Ровинский Ф.Я., Рябошапка А.Г., Филиппова Л.М.* Кислотные дожди. – Л.: Гидрометеиздат, 1983. – 206 с.
- [9] *Anderson G.E.* Mesoscale influences on wind fields // J. Appl. Meteor. – 1971. – № 10. – Pp. 377-386.
- [10] *Fulton S.R. and Schubert W.H.* Chebyshev spectral methods for limited- area models, Part I. Model problem analysis. Mon. Wea. Rev. – 1987. – № 115. – Pp. 1940-1953.
- [11] *Huber A.H., Snyder W.H.* Building Wake effects on Short Stack Effluents. Preprint Volume for Triad Symposium Atmospheric Diffusion and Air Quality. American Meteorological Society. – Boston, 1976.
- [12] *Чуб А.И.* Математическая модель оптимизационной задачи размещения пожароопасных объектов с учетом рельефа области размещения // Радіоелектроніка, інформатика, управління випуск. – 2013. – № 1. – С. 88-93.
- [13] *Сухинов А.И., Гадельшин В.К., Любомищенко Д.С.* Математическая модель распространения вредных выбросов от автотранспортных средств на основе метода контрольного объема и ее параллельная реализация на кластере распределенных вычислений // Известия Южного федерального университета. Технические науки. – 2009. – № 2. – Т. 91. – С. 8-14.
- [14] *Гадельшин В.К., Любомищенко Д.С., Сухинов А.И.* Математическое моделирование поля ветровых течений и распространения загрязняющих примесей в условиях городского рельефа местности с учетом к-ε модели турбулентности // Известия Южного федерального университета. Технические науки. – 2010. – Т. 107. – № 6. – С. 48-67.
- [15] *Kordzadze A.* Mathematical modelling of dynamical and ecological processes in the system sea-land-atmosphere // Air, Water and Soil Quality Modelling for Risk and Impact Assessment. – 2007. – Pp. 181-193.
- [16] *Ravshanov N., Shertaev M., Toshtemirova N.* Mathematical Model for the Study and Forecast of the Concentration of Harmful Substances in the Atmosphere // American Journal of Modeling and Optimization. – 2015. – Vol. 3. – № 2. – Pp. 35-39.
- [17] *Равшанов Н., Шарипов Д.К., Ахмедов Д.* Моделирование процесса загрязнения окружающей среды с учетом рельефа местности погоднo-климатических факторов // Информационные технологии моделирования и управления. – Воронеж, 2015. – № 3. – С. 222-235.
- [18] *Ravshanov N., Sharipov D., Muradov F.* Computational experiment for forecasting and monitoring the environmental condition of industrial regions // Theoretical & Applied Science : International Scientific Journal. – 2016. – Vol. 35. – Issue 3. – Pp. 132-139. – Doi: <http://dx.doi.org/10.15863/TAS.2016.03.35.22>.
- [19] *Sharipov D.* A Mathematical Model and Computational Experiment for the Study and Forecast of the Concentration of Harmful Substances in the Atmosphere // American Journal of Computation, Communication and Control. – 2016. – № 2(6). – Pp. 48-54.
- [20] *Равшанов Н., Шарипов Д.К.* Модель и численный алгоритм для исследования процесса распространения вредных веществ в атмосфере // Актуальные вопросы технических наук: Материалы международной научной конференции. – Пермь, 2011. – С. 20-27.