

УДК 519.6+004.9:504.064

Численный алгоритм математической модели расчета плотности вредных веществ в атмосфере

Мурадов Ф.А.^{1,3}, Кучаров О.Р.², Эшбоева Н.Ф.³

Самаркандский филиал Ташкентского университета информационных технологий¹,
Национальный исследовательский университет «Ташкентский институт инженеров
ирригации и механизации сельского хозяйства»², Научно-исследовательский
институт развития цифровых технологий и искусственного интеллекта³

Аннотация: В статье представлен алгоритм численного решения математической модели для расчета значений плотности вредных веществ в разные моменты времени в разных точках региона.

Ключевые слова: математическая модель, плотность, диффузия, аппроксимация.

1. Введение

В мире активно проводятся научные исследования, ориентированные на разработку более усовершенствованных математических моделей процессов транспорта и диффузии вредных антропогенных и природных выбросов в атмосферу. При создании математического аппарата для исследования указанной проблемы особое внимание уделяется, в частности, таким важным аспектам, как учет погодных-климатических характеристик и топографии рассматриваемых территорий, эмиссии вредных частиц в атмосферу с поверхности земли вследствие турбулентного движения воздушной массы, изменений плотности мелкодисперсных частиц в зависимости от их физико-механических свойств.

В статье [1] процесс распространения вредных веществ в атмосфере описан с использованием двумерных эллиптических уравнений. Также в данной работе представлены вычислительные эксперименты для различных значений высот.

В работе [2] изучен процесс распространения транспортных выбросов в атмосферу в разное время года с учетом метеорологических параметров США.

В статье [3] изучен процесс распространения тяжелых вредных веществ в атмосфере на строительных объектах. Исследования показывают, что распространение вредных веществ зависит от высоты здания, скорости ветра и направления, а ширина здания играет незначительную роль.

2. Постановка задачи

Разработана математическая модель для расчета плотности аэрозольных частиц в атмосфере на основе законов гидромеханики [4]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial \rho}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\kappa \frac{\partial \rho}{\partial z} \right) + I_8; \quad (1)$$

с соответствующими начальными и граничными условиями:

$$\rho(x, y, z)|_{t=0} = \rho_c; \quad (2)$$

$$\alpha_9 \rho \mu \left. \frac{\partial \rho}{\partial x} \right|_{x=0} = \alpha_{10} (\rho - \rho_0), \quad \beta_9 \rho \mu \left. \frac{\partial \rho}{\partial x} \right|_{x=L_x} = \beta_{10} (\rho - \rho_0), \quad (3)$$

$$\alpha_{11} \rho \mu \left. \frac{\partial \rho}{\partial y} \right|_{y=0} = \alpha_{12} (\rho - \rho_0), \quad \beta_{11} \rho \mu \left. \frac{\partial \rho}{\partial y} \right|_{y=L_y} = \beta_{12} (\rho - \rho_0), \quad (4)$$

$$\left. \frac{\partial \rho}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \rho}{\partial z} \right|_{z=L_z} = 0. \quad (5)$$

Здесь ρ – плотность вредных частиц; ρ_c – начальная плотность вредных частиц; ρ_0 – плотность атмосферы; u, v, w – скорости ветра по направлениям x, y, z .

3. Методы решения

Для упрощения решения задачи (1)-(5) область

$$D = (0 \leq x \leq L_x, 0 \leq y \leq L_y, 0 \leq z \leq H_z,)$$

рассмотрим как прямоугольную, а источник загрязнения считаем расположенным в приземном слое. Тогда для численного решения задачи (1)-(5) область изменения искомых переменных с учетом граничных условий покроем сеткой с шагами $\Delta x, \Delta y, \Delta z, \Delta t$:

$$\Omega_{xyzt} = \{(x_i = i\Delta x, y_j = j\Delta y, z_k = k\Delta z, \tau_n = n \Delta t); \\ i = \overline{0, N}; j = \overline{0, M}, k = \overline{0, L}, n = \overline{0, N_t}, \Delta t = \frac{1}{N_t}\}.$$

Для сохранения устойчивости при решении задач (1)-(5) использована неявная схема, в уравнении (1) применяем аппроксимацию второго порядка относительно времени по направлению Ox [5-7]:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \frac{\rho_{i,j,k}^{n+1/3} - \rho_{i,j,k}^n}{\Delta t/3} + \frac{1}{2} \frac{\rho_{i+1,j,k}^{n+1/3} - \rho_{i+1,j,k}^n}{\Delta t/3} + \frac{u_{i,j,k}^{n+1/3} \rho_{i,j,k}^{n+1/3} - u_{i-1,j,k}^{n+1/3} \rho_{i-1,j,k}^{n+1/3}}{2\Delta x} + \\ & \frac{u_{i,j,k}^n \rho_{i,j,k}^n - u_{i-1,j,k}^n \rho_{i-1,j,k}^n}{2\Delta x} + \frac{v_{i,j,k}^n \rho_{i,j,k}^n - v_{i,j-1,k}^n \rho_{i,j-1,k}^n}{\Delta y} + \\ & \frac{w_{i,j,k}^n \rho_{i,j,k}^n - w_{i,j,k-1}^n \rho_{i,j,k-1}^n}{\Delta z} = \frac{1}{\Delta x^2} \left(\mu_{i+0,5,j} \rho_{i+1,j,k}^{n+1/3} - \right. \\ & \left. - (\mu_{i+0,5,j} + \mu_{i-0,5,j}) \rho_{i,j,k}^{n+1/3} + \mu_{i-0,5,j} \rho_{i-1,j,k}^{n+1/3} \right) + \\ & + \frac{1}{\Delta y^2} \left(\mu_{i,j+0,5} \rho_{i,j+1,k}^n - (\mu_{i,j+0,5} + \mu_{i,j-0,5}) \rho_{i,j,k}^n + \right. \\ & \left. + \mu_{i,j-0,5} \rho_{i,j-1,k}^n \right) + \frac{1}{\Delta z^2} \left(\kappa_{k+0,5} \rho_{i,j,k+1}^n - (\kappa_{k+0,5} + \kappa_{k-0,5}) \rho_{i,j,k}^n + \kappa_{k-0,5} \rho_{i,j,k-1}^n \right) + \frac{1}{3} I_8. \end{aligned}$$

При раскрытии скобок приводя подобные члены получим следующую систему линейных алгебраических уравнений:

$$a_{\rho,i,j,k} \rho_{i-1,j,k}^{n+1/3} - b_{\rho,i,j,k} \rho_{i,j,k}^{n+1/3} + c_{\rho,i,j,k} \rho_{i+1,j,k}^{n+1/3} = -d_{\rho,i,j,k}, \quad (6)$$

Коэффициенты и свободные члены для системы линейных алгебраических уравнений определяются следующим образом:

$$a_{\rho,i,j,k} = \frac{\mu_{i-0,5,j}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i-1,j,k}^{n+1/3}}{2\Delta x}; \quad b_{\rho,i,j,k} = \frac{\mu_{i+0,5,j} + \mu_{i-0,5,j}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j,k}^{n+1/3}}{2\Delta x} + \frac{3}{2\Delta t};$$

$$c_{\rho, i, j, k} = \frac{\mu_{i+0,5, j}}{\Delta x^2} - \frac{3}{2\Delta t};$$

$$d_{\rho, i, j, k} = \left(\frac{3}{2\Delta t} - \frac{\mu_{i, j+0,5} + \mu_{i, j-0,5}}{\Delta y^2} - \frac{\kappa_{k+0,5} + \kappa_{k-0,5}}{\Delta z^2} - \frac{u_{i, j, k}^n}{2\Delta x} - \frac{v_{i, j, k}^n}{\Delta y} - \frac{w_{i, j, k}^n}{\Delta z} \right) \rho_{i, j, k}^n +$$

$$+ \frac{u_{i-1, j, k}^n}{2\Delta x} \rho_{i-1, j, k}^n + \frac{3}{2\Delta t} \rho_{i+1, j, k}^n + \left(\frac{\mu_{i, j-0,5}}{\Delta y^2} + \frac{v_{i, j-1, k}^n}{\Delta y} \right) \rho_{i, j-1, k}^n + \frac{\mu_{i, j+0,5}}{\Delta y^2} \rho_{i, j+1, k}^n +$$

$$+ \left(\frac{\kappa_{k-0,5}}{\Delta z^2} + \frac{w_{i, j, k-1}^n}{\Delta z} \right) \rho_{i, j, k-1}^n + \frac{\kappa_{k+0,5}}{\Delta z^2} \rho_{i, j, k+1}^n + \frac{1}{3} I_8.$$

Граничные условия (3) при $x = 0$ аппроксимируем с точностью второго порядка следующим образом:

$$\alpha_9 \tilde{\rho} \mu_{0, j} \frac{-3\rho_{0, j, k}^{n+1/3} + 4\rho_{1, j, k}^{n+1/3} - \rho_{2, j, k}^{n+1/3}}{2\Delta x} = \alpha_{10} \rho_{0, j, k}^{n+1/3} - \alpha_{10} \rho_0.$$

Упростив это выражение, получим коэффициенты прогонки:

$$\alpha_{\rho, 0, j, k} = \frac{-4c_{\rho, 1, j, k} \tilde{\rho} \alpha_9 \mu_{0, j} + b_{\rho, 1, j, k} \tilde{\rho} \alpha_9 \mu_{0, j}}{-3c_{\rho, 1, j, k} \tilde{\rho} \alpha_9 \mu_{0, j} + a_{\rho, 1, j, k} \tilde{\rho} \alpha_9 \mu_{0, j} - 2\Delta x \alpha_{10}};$$

$$\beta_{\rho, 0, j, k} = \frac{-d_{\rho, 1, j, k} \tilde{\rho} \alpha_9 \mu_{0, j} - 2\Delta x \alpha_{10} c_{\rho, 1, j, k} \rho_0}{-3c_{\rho, 1, j, k} \tilde{\rho} \alpha_9 \mu_{0, j} + a_{\rho, 1, j, k} \tilde{\rho} \alpha_9 \mu_{0, j} - 2\Delta x \alpha_{10}}.$$

Граничные условия (3) при $x = L_x$ аппроксимируем с точностью второго порядка следующим образом:

$$\beta_9 \tilde{\rho} \mu_{N, j} \frac{\rho_{N-2, j, k}^{n+1/3} - 4\rho_{N-1, j, k}^{n+1/3} + 3\rho_{N, j, k}^{n+1/3}}{2\Delta x} = \beta_{10} \rho_{N, j, k}^{n+1/3} - \beta_{10} \rho_0 \quad (7)$$

Упростив это выражение, получим выражение для $\rho_{N, j, k}^{n+1/3}$:

$$\rho_{N, j, k}^{n+1/3} = \frac{-2\Delta x \beta_{10} \rho_0 - (\beta_{\rho, N-2, j, k} + \alpha_{\rho, N-2, j, k} \beta_{\rho, N-1, j, k} - 4\beta_{\rho, N-1, j, k}) \tilde{\rho} \beta_9 \mu_{N, j}}{-2\Delta x \beta_{10} + (\alpha_{\rho, N-2, j, k} \alpha_{\rho, N-1, j, k} - 4\alpha_{\rho, N-1, j, k} + 3) \tilde{\rho} \beta_9 \mu_{N, j}}.$$

Последовательность значений концентраций $\rho_{N-1, j, k}^{n+1/3}$, $\rho_{N-2, j, k}^{n+1/3}$... $\rho_{1, j, k}^{n+1/3}$ находится методом обратной прогонки:

$$\rho_{i, j, k}^{n+1/3} = \alpha_{\rho, i, j, k} \rho_{i+1, j, k}^{n+1/3} + \beta_{\rho, i, j, k}; \quad i = \overline{N-1, 0}, \quad j = \overline{1, M-1}, \quad k = \overline{1, L-1}.$$

Аналогичную последовательность действий применим при исследовании по осям Oy и Oz .

4. Заключение

Для исследования математической модели, описывающей распределение плотности вредных веществ был разработан численный алгоритм на основе неявной схемы с аппроксимацией второго порядка по времени.

Вычислительные эксперименты показывают, что значения плотности вредных веществ различны в разные моменты времени в разных точках региона.

Литература

1. Frana, Karel. Simulations of unsteady turbulent flows using the finite element method. 2008. P. 58-63.
2. Martin, William. The Application of the Finite Element Method to the Neutron Transport Equation. 1976.
3. Chen, Jianing Chen, Guoyan Zhang, Anchao Deng, Haoxin Wen, Xiaoping Wang, Fahui Sheng, Wei Hongxiang, Zheng. Numerical Simulation of the Effect of CH₄/CO Concentration on Combustion Characteristics of Low Calorific Value Syngas. ACS Omega. 2021. XXXX. 10.1021/acsomega.0c06176.
4. Ravshanov N., Narzullayeva N.U., Tashtemirova N.N., Muradov F.A., Islamov Y.N. Software and instrumental complex for decision-making on environmental protection from technogenic factors // Advances in Materials, Systems and Technologies (CAMSTech-II-2021): Proceedings of II International Scientific Conference, 29-31 July 2021. Krasnoyarsk (Russia), 2021. P. 1-7.
5. Равшанов Н., Мурадов Ф., Ахмедов Д. Метод операторного расщепления для численного решения задачи рассеивания загрязняющих веществ в атмосфере // Физический журнал: Серия конференций. Лондон, 2020. Том. 1441. 012164.
6. Мурадов Ф., Ахмедов Д. Численное моделирование рассеяния загрязнителей атмосферы с учетом скорости осаждения частиц // Международная конференция IEEE по информационным наукам и коммуникационным технологиям (ICISCT). 4-6 ноября 2019 г. Ташкент, 2019. С. 1-5.
7. Шарипов Д., Мурадов Ф., Ахмедов Д. Метод численного моделирования для краткосрочного прогноза качества воздуха в промышленных регионах // Электронные записки прикладной математики. 2019. № 19. С. 575-584.

MSC 65C20

Numerical algorithm for a mathematical model for computing the density of harmful substances in the atmosphere

F.A. Muradov^{1,3}, O.R. Kucharov², N.F. Eshboeva³

Samarkand branch of Tashkent University of Information Technologies¹, «Tashkent institute of irrigation and agricultural mechanization engineers» National Research University², Research Institute for the Development of Digital Technologies and artificial intelligence³

Abstract: This article presents an algorithm for the numerical solution of a mathematical model that calculates the density of harmful substances at different times and at different points in the region.

Keywords: mathematical model, density, diffusion, approximation.

References

1. Frana, Karel. Simulations of unsteady turbulent flows using the finite element method. 2008. P. 58-63.
2. Martin, William. The Application of the Finite Element Method to the Neutron Transport Equation. 1976.
3. Chen, Jianing Chen, Guoyan Zhang, Anchao Deng, Haoxin Wen, Xiaoping Wang, Fahui Sheng, Wei Hongxiang, Zheng. Numerical Simulation of the Effect of CH₄/CO Concentration on Combustion Characteristics of Low Calorific Value Syngas. ACS Omega. 2021. XXXX. 10.1021/acsomega.0c06176.
4. Ravshanov N., Narzullayeva N.U., Tashtemirova N.N., Muradov F.A., Islamov Y.N. Software and instrumental complex for decision-making on environmental protection from technogenic factors // Advances in Materials, Systems and Technologies (CAMSTech-II-2021) : Proceedings of II International Scientific Conference, 29-31 July 2021. Krasnoyarsk (Russia), 2021. P. 1-7.
5. Ravshanov N., Muradov F., Akhmedov D. Operator splitting method for numerical solving the atmospheric pollutant dispersion problem // Journal of Physics: Conference Series. London, 2020. Vol. 1441. 012164.
6. Muradov F., Akhmedov D. Numerical Modeling of Atmospheric Pollutants Dispersion Taking Into Account Particles Settling Velocity // IEEE International Conference on Information Science and Communications Technologies (ICISCT). 4-6 Nov. 2019. Tashkent, 2019. P. 1-5.
7. Sharipov D., Muradov F., Akhmedov D. Numerical Modeling Method for Short-Term Air Quality Forecast in Industrial Regions // Applied Mathematics E-Notes. 2019. № 19. P. 575-584.