SCIENTIFIC COLLECTION INTERCONF

№ 57
May, 2021

THE ISSUE CONTAINS:

Proceedings of the 4th International Scientific and Practical Conference

SCIENTIFIC COMMUNITY: INTERDISCIPLINARY RESEARCH

HAMBURG, GERMANY

18-19.05.2021

InterConf
Scientific Publishing Center

SCIENTIFIC COLLECTION «INTERCONF»

№ 57 | May, 2021

THE ISSUE CONTAINS:

Proceedings of the 4th International Scientific and Practical Conference

SCIENTIFIC COMMUNITY: INTERDISCIPLINARY RESEARCH

HAMBURG, GERMANY

18-19.05.2021

HAMBURG
2021

MODELING AND NANOTECHNOLOGY

Шафиев Турсун Рустамович
докторант кафедры «прикладная математика и технологии программирования»
Бухарского государственного университета, Республика Узбекистан

НЕЛИНЕЙНАЯ МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА ПЕРЕНОСА И ДИФФУЗИИ ВРЕДНЫХ ВЕЩЕСТВ В АТМОСФЕРЕ С УЧЕТОМ ПЕРЕМЕННОЙ СКОРОСТИ ЧАСТИЦ И ОРОГРАФИИ МЕСТНОСТИ

Аннотация. *В статье рассматривается математическое моделирование процесса переноса и диффузии вредных веществ в пограничном слое атмосферы. Разработанном нелинейном математическом модели мониторинга и прогнозирования распространения промышленных выбросов в атмосфере учитывается два существенных параметра – скорости перемещения мелкодисперсных субстанции в атмосфере и орография местности рассматриваемого региона. Для решения задачи разработан численный алгоритм со вторым порядком точности по времени и пространственным переменным. На основе разработанной математической модели эффективного численного алгоритма был создан программный комплекс для проведения вычислительные эксперименты на компьютере.*

Ключевые слова*: математическая модель, перенос и диффузия вредных веществ, численный алгоритм.*

Введение. Экологический проблемой подразумевается понятия изменения природного среды, ведущий к разрушению или нарушению структуры и функционирования природы. Основными факторами нарушения экологических проблем являются природные и антропогенные факторы.

На сегодняшний день развития экономики стран требует мощной стройки промышленных объектов, которые год-за-годом существенно влияет на экологию атмосферы промышленных зон. Таким образом, прогнозирование, мониторинг и оценка экологического состояния атмосферы и подстилающей поверхности пассивными и активными примесями, размещения промышленных предприятий с соблюдением санитарных норм загрязнения регионов являются актуальными в проблеме охраны окружающей среды. Анализ статических данных показывает, что ухудшение экологии в атмосфере промышленных зон возникает в связи с увеличением концентрации вредных веществ и загазованности атмосферы. Из этого следует что актуальность математического моделирования процесса распространения вредных аэрозольных частиц очевидна.

Для исследования, прогнозирования и мониторинга экологического состояния промышленных регионов разработаны математические инструменты, состоящие из – математическая модель, численный алгоритм и программные средства для проведения вычислительного эксперимента на ЭВМ и получены значительные теоретические и прикладные результаты по выше указанной проблемой.

Из анализа проведенных многолетних наблюдений следует, что ни одна стратегия сокращения выбросов и контроля не может быть экономически эффективной без серьезного предварительного применения методов математического моделирования выше указанной задачи. За последние годы учёными разработаны математические инструменты для исследования, прогнозирования и мониторинга экологического состояния промышленных регионов, которые основывается на математическую модель [1,2] , численного алгоритма [3] и программного средства для проведения вычислительных экспериментов на ЭВМ и получены значительные теоретические и прикладные результаты по выше указанной проблемой.

Качественный обзор научных исследований, посвящённых к математическому моделированию экологического состояния атмосферы регионов показало, что во многих работах при моделирования исследуемого процесса не учитывается существенно влияющие параметры, такие как физика-механические свойства рассматриваемых частиц, изменяющий по времени коэффициент поглощения, скорость воздушного потока, подъемная сила воздушного потока и орография местности рассматриваемого региона. Исходя из этого, целью данного статьи является разработка математического модели учитывающий вышеуказанных параметров.

Постановка задачи. Для исследования процесса переноса и диффузии аэрозольных частиц в атмосфере с учетом существенных параметров $u_ч, v_ч, w_ч$ составляющие скорости частиц по направлениям x, y, z соответственно и орографии месности рассмотрим математическую модель, описывающую на основе закона гидромеханики с помощью многомерного дифференциального уравнения в частных производных [4–6]:

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} + u_ч\frac{\partial(h\theta)}{\partial x} + v_ч\frac{\partial(h\theta)}{\partial y} + w_ч\frac{\partial(h\theta)}{\partial z} + \sigma h\theta = \\ = \mu\left(\frac{\partial^2(h\theta)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(h\theta)}{\partial y^2}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\kappa\frac{\partial(h\theta)}{\partial z}\right) + \delta Q; \tag{1}$$

$$m\frac{du_ч}{dt} = c_f\pi r^2\rho_в(u_ч - U)^2; \tag{2}$$

$$m\frac{dv_ч}{dt} = c_f\pi r^2\rho_в(v_ч - U)^2; \tag{3}$$

$$m\frac{dw_ч}{dt} = -\frac{4}{3}\pi r^3(\rho_ч - \rho_в)g - k_f\mu_в\pi r w_ч + F_n \tag{4}$$

с начальными

$$\theta\big|_{t=0} = \theta^0;\ u_ч\big|_{t=0} = u_ч^0;\ v_ч\big|_{t=0} = v_ч^0;\ w_ч\big|_{t=0} = w_ч^0 \tag{5}$$

и граничными условиями

$$-\mu\frac{\partial(h\theta)}{\partial x}\bigg|_{x=0} = \xi h\left(\theta_в - \theta\right); \qquad \mu\frac{\partial(h\theta)}{\partial x}\bigg|_{x=L_x} = \xi h\left(\theta_в - \theta\right); \tag{6}$$

$$-\mu\frac{\partial(h\theta)}{\partial y}\bigg|_{y=0} = \xi h\left(\theta_в - \theta\right); \qquad \mu\frac{\partial(h\theta)}{\partial y}\bigg|_{y=L_y} = \xi h\left(\theta_в - \theta\right); \tag{7}$$

$$-\kappa\frac{\partial(h\theta)}{\partial z}\bigg|_{z=0} = \xi h\left(\beta\theta - Q_0\right); \qquad \kappa\frac{\partial(h\theta)}{\partial z}\bigg|_{z=H} = \xi h\left(\theta_в - \theta\right). \tag{8}$$

Здесь θ – концентрация вредных веществ; $U = \sqrt{u^2 + v^2 + w^2}$ – *скорость воздушного потока;* $u_ч, v_ч, w_ч$ - *составляющие скорости распространения вредных веществ по направлениям;* m - *масса частицы;* θ^0 - *начальная концентрация вредных веществ в атмосфере;* σ - *коэффициент поглощения* *вредных веществ а атмосфере;* δ *- функция Дирака; g – ускорение свободного падения; μ - коэффициент диффузии;* β *- коэффициент взаимодействия с подстилающей поверхности;* Q *- мощность источников;* κ *- коэффициент турбулентности;* ξ *- коэффициент массообмена через границы расчета;* $\theta_в$ *- концентрация вредных веществ за пределом области решения задачи* c_f *- коэффициент сопротивление частиц воздушному потоку; r – радиус частицы;* $\rho_в$ *- плотность воздуха;* $\rho_ч$ *- плотность частицы;* k_f *- коэффициент формы тела для силы сопротивления;* $\mu_в$ *- коэффициент динамической вязкости воздуха;* $F_п$ *- подъемная сила потока воздуха;* h *- орография местности,* Q_0 *- мощность выброса вредных веществ в атмосферу с подстилающей поверхности земли;*

Параметр для определения рельефа местности определяется при помощи соотношении [7,8]:

$$h = \begin{cases} 0 - \text{если слой находиться под землой;} \\ 1 - \text{если слой находится в атмосфере;} \\ \left(\eta - z_{k-0,5}\right) / \Delta z - \text{если слой находится под} \\ \text{орографической поверхностью.} \end{cases}$$

Здесь η *– высота возвышенности над плоскостью, параллельной уровню моря, а* $\Delta z = z_{k+0,5} - z_{k-0,5}$. *Для каждого слоя вводится множитель* h $(0 \le h \le 1)$, *определяющий степень блокирования воздушного потока.*

Метод решения. Так как, задача (1) - (8) описывается многомерным нелинейным дифференциальным уравнением в частных производных с соответствующими начальными и краевыми условиями, то получить ее решение в аналитической форме затруднительно. Для решения задачи используем неявную конечно-разностную схему по времени со вторым порядком точности соответственно по x, y, z и в конечном итоге получим система алгебраических уравнений относительно Ox [9,10]:

$$a_{i,j,k}\theta_{i-1,j,k}^{n+1/3}-b_{i,j,k}\theta_{i,j,k}^{n+1/3}+c_{i,j,k}\theta_{i+1,j,k}^{n+1/3}=-d_{i,j,k},$$

где прогоночные коэффициенты $\alpha_{0,j,k}$ и $\beta_{0,j,k}$ вычисляется с помощью:

$$a_{i,j,k}=\frac{\mu h_{i-0,5,j,k}}{\Delta x^2}+\frac{u_ч^{n+1/3}+\left|u_ч^{n+1/3}\right|}{4\Delta x}h_{i-0,5,j,k};$$

$$b_{i,j,k}=\frac{\mu h_{i+0,5,j,k}+\mu h_{i-0,5,j,k}}{\Delta x^2}+\frac{\left|u_ч^{n+1/3}\right|h_{i,j,k}}{2\Delta x}+\frac{3}{2\Delta t}+h_{i,j,k}\sigma;$$

$$c_{i,j,k}=\frac{\mu h_{i+0,5,j,k}}{\Delta x^2}-\frac{u_ч^{n+1/3}-\left|u_ч^{n+1/3}\right|}{4\Delta x}h_{i+0,5,j,k}-\frac{3}{2\Delta t};$$

$$d_{i,j,k}=\left(\frac{3}{2\Delta t}-\frac{h_{i,j+0,5,k}+h_{i,j-0,5,k}}{\Delta y^2}\mu-\right.$$

$$\left.-\frac{\kappa_{k+0,5}h_{i,j,k+0,5}+\kappa_{k-0,5}h_{i,j,k-0,5}}{\Delta z^2}-\frac{\left|u_ч^{n+1/3}\right|h_{i,j,k}}{2\Delta x}-\frac{\left|v_ч^{n+1/3}\right|h_{i,j,k}}{\Delta y}-\frac{\left|w_ч^{n+1/3}\right|h_{i,j,k}}{\Delta z}\right)\theta_{i,j,k}^{n}+$$

$$+\left(\frac{u_ч^{n+1/3}+\left|u_ч^{n+1/3}\right|}{4\Delta x}h_{i-0,5,j,k}\right)\theta_{i-1,j,k}^{n}+\left(\frac{3}{2\Delta t}-\frac{u_ч^{n+1/3}-\left|u_ч^{n+1/3}\right|}{4\Delta x}h_{i+0,5,j,k}\right)\theta_{i+1,j,k}^{n}+$$

$$+\left(\frac{\mu}{\Delta y^2}+\frac{v_ч^{n+1/3}+\left|v_ч^{n+1/3}\right|}{2\Delta y}\right)h_{i,j-0,5,k}\theta_{i,j-1,k}^{n}+\left(\frac{\mu}{\Delta y^2}-\frac{v_ч^{n+1/3}-\left|v_ч^{n+1/3}\right|}{2\Delta y}\right)h_{i,j+0,5,k}\theta_{i,j+1,k}^{n}+$$

$$+\left(\frac{\kappa_{k-0,5}}{\Delta z^2}+\frac{w_ч^{n+1/3}+\left|w_ч^{n+1/3}\right|}{2\Delta z}\right)h_{i,j,k-0,5}\theta_{i,j,k-1}^{n}+$$

$$+\left(\frac{\kappa_{k+0,5}}{\Delta z^2}-\frac{w_ч^{n+1/3}-\left|w_ч^{n+1/3}\right|}{2\Delta z}\right)h_{i,j,k+0,5}\theta_{i,j,k+1}^{n}+\frac{1}{3}\delta_{i,j,k}Q.$$

Аппроксимируя граничное условия (6) при $x=0$, открывая скобки, группируя схожие члены уравнения получим значения $\theta_{0,j,k}^{n+1/3}$:

$$\theta_{0,j,k}^{n+1/3}=\frac{4\mu c_{1,j,k}h_{0,5,j,k}-b_{1,j,k}\mu h_{1,j,k}}{3\mu c_{1,j,k}h_{0,j,k}-a_{1,j,k}\mu h_{1,j,k}+2\Delta x\xi c_{1,j,k}h_{0,j,k}}\theta_{1,j,k}^{n+1/3}+$$

$$+\frac{d_{1,j,k}\mu h_{1,j,k}+2\Delta x\xi c_{1,j,k}h_{0,j,k}\theta_в}{3\mu c_{1,j,k}h_{0,j,k}-a_{1,j,k}\mu h_{1,j,k}+2\Delta x\xi c_{1,j,k}h_{0,j,k}};$$

где $\alpha_{0,j,k}$ *и* $\beta_{0,j,k}$ *определяются следующим образом:*

$$\alpha_{0,j,k}=\frac{4\mu c_{1,j,k}h_{0,5,j,k}-b_{1,j,k}\mu h_{1,j,k}}{3\mu c_{1,j,k}h_{0,j,k}-a_{1,j,k}\mu h_{1,j,k}+2\Delta x\xi c_{1,j,k}h_{0,j,k}};$$

$$\beta_{0,j,k}=\frac{d_{1,j,k}\mu h_{1,j,k}+2\Delta x\xi c_{1,j,k}h_{0,j,k}\theta_{в}}{3\mu c_{1,j,k}h_{0,j,k}-a_{1,j,k}\mu h_{1,j,k}+2\Delta x\xi c_{1,j,k}h_{0,j,k}}.$$

Далее, аппроксимируя граничное условия (6) при $x=L_x$, открывая скобки, группируя схожие члены уравнения получим значения $\theta_{N,j,k}^{n+1/3}$:

$$\theta_{N,j,k}^{n+1/3}=\frac{2\Delta x\xi h_{N,j,k}\theta_{в}-\left(\alpha_{N-2,j,k}\beta_{N-1,j,k}h_{N-1,j,k}+\beta_{N-2,j,k}h_{N-1,j,k}-4\beta_{N-1,j,k}h_{N-0,5,j,k}\right)\mu}{\left(\alpha_{N-2,j,k}\alpha_{N-1,j,k}h_{N-1,j,k}-4\alpha_{N-1,j,k}h_{N-0,5,j,k}+3h_{N,j,k}\right)\mu+2\Delta x\xi h_{N,j,k}}.$$

Значения последовательности концентрации $\theta_{N-1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}$, $\theta_{N-2,j,k}^{n+\frac{1}{3}}$, ..., $\theta_{1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}$ определяется методом обратной прогонки.

Аналогично, используя вышеуказанные действия выполняется для направлений *Oy* и *Oz*.

Для вычисления уравнений (2)-(4) используется неявная конечно-разностная схема для каждого направления, т.е. по направлению *Ox* и получим:

$$u_{ч}^{n+\frac{1}{3}}=\frac{3m}{3m-2c_f\pi r^2\rho_{в}\tilde{u}\Delta t+2c_f\pi r^2\rho_{в}U\Delta t}u_{ч}^{n}-\frac{c_f\pi r^2\rho_{в}\tilde{u}^2\Delta t+c_f\pi r^2\rho_{в}U^2\Delta t}{3m-2c_f\pi r^2\rho_{в}\tilde{u}\Delta t+2c_f\pi r^2\rho_{в}U\Delta t};$$

$$v_{ч}^{n+\frac{1}{3}}=\frac{3m}{3m-2c_f\pi r^2\rho_{в}\tilde{v}\Delta t+2c_f\pi r^2\rho_{в}U\Delta t}v_{ч}^{n}-\frac{c_f\pi r^2\rho_{в}\tilde{v}^2\Delta t+c_f\pi r^2\rho_{в}U^2\Delta t}{3m-2c_f\pi r^2\rho_{в}\tilde{v}\Delta t+2c_f\pi r^2\rho_{в}U\Delta t};$$

$$w_{ч}^{n+\frac{1}{3}}=\frac{9m}{9m+3k_f\mu_{в}\pi r\Delta t}w^{n}-\frac{4\pi r^3\left(\rho_n-\rho_{в}\right)g\Delta t-3F_n\Delta t}{9m+3k_f\mu_{в}\pi r\Delta t}.$$

Аналогично, используя вышеуказанную технологию вычисляется значения $u_{ч}^{n+\frac{2}{3}},u_{ч}^{n+1},v_{ч}^{n+\frac{2}{3}},v_{ч}^{n+1},w_{ч}^{n+\frac{2}{3}},w_{ч}^{n+1}$ на каждом временном слое.

Сходимость итерационного процесса проверяться с помощью условий:

$$\left|u^{(s+1)}-u^{(s)}\right|<\varepsilon;\left|v^{(s+1)}-v^{(s)}\right|<\varepsilon;\left|w_g^{(s+1)}-w_g^{(s)}\right|<\varepsilon;$$

здесь ε *- требуемая точность решения,* s *- число итерации, при этом начальное итерационное значение выбирается равным решению на предыдущем временном слое.*

Выводы. Разработана математическая модель для прогнозирования, мониторинга и оценки экологического состояния атмосферы и подстилающей поверхности загрязняющими веществами, где учитываются орография местности и изменяющаяся скорость перемещения частиц в атмосфере.

Для вычисления скоростей перемещения частиц вредных веществ в атмосфере получена система нелинейных уравнений, где учтены основные физико-механические свойства частиц и скорость перемещения воздушной массы атмосферы.

Для определения соотношения рельефа местности предложена функциональная зависимость, которая определяет коэффициента орографии местности на каждом временном слое.

Так как разработанная нелинейная математическая модель мониторинга и прогнозирования процесса распространения вредных веществ в атмосфере описывается многомерным нелинейным дифференциальным уравнением в частных производных с соответствующими начальными и краевыми условиями, для ее решения разработан численный алгоритм с использованием неявной конечно-разностной схемы со вторым порядком точности.

Полученные результаты в виде математического обеспечения могут быть успешно использованы для мониторинга распростронения вредных веществ в атмосфере, а также оптимального размещения вновь построенных объектов в промышленных регионах; для оценки масштабов промышленных выбросов в окружающую среду; для оценки концентраций вредных веществ в атмосфере и на подстилающей поверхности с последующим принятием решений по минимизации рисков нарушения окружающей среды.

Список источников:

1. Алоян А.Е. Динамика и кинетика газовых примесей и аэрозолей в атмосфере. М.: ИВМ РАН, 2002. 201 с.
2. Марчук Г.. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982. 320 с.
3. Тихонов В.И., Самарский А.А. Уровнения математической физики. М.: ФИЗМАТЛИТ, 1979. 742 р.

4. Ravshanov N., Shafiev T.R. Nonlinear mathematical model for monitoring and predicting the process of transfer and diffusion of fine-dispersed aerosol particles in the atmosphere // Journal of Physics: Conference Series. 2019.
5. Шафиев Т.Р. Математическая модель для мониторинга и прогнозирования процесса распространения аэрозольных частиц в атмосфере // Проблемы вычислительной и прикладной математики. 2020. № 1(25). С. 69–84.
6. Равшанов Н., Шафиев Т., Таштемирова Н. Нелинейная математическая модель для мониторинга и прогнозирования процесса распространения аэрозольных частиц в атмосфере // Вестник ТУИТ. 2019. № 2. С. 45–60.
7. Равшанов, Н. Таштемирова Н., Ахмедов Д. Информация, информационные технологии и моделирование как инструмент для анализа и прогнозирования экологического состояния окружающей среды // Экологические чтения-2012. Омск, 2012. С. 199–207.
8. Таштемирова Н.Н. Разработка математической модели и численных алгоритмов для прогнозирования процесса распространения вредных веществ в атмосфере с учетом эрозии почвы : Диссертация доктора философии (PhD) по техническим наукам. НИЦ ИКТ при ТУИТ, 2019.
9. Ravshanov N., Shafiev T.R., Tashtemirova N. Nonlinear mathematical model for monitoring and forecasting the process of distributing aerosol particles in the atmosphere // Bull. TUIT Manag. Commun. Technol. 2018. Vol. 1. pp. 1–9.
10. Ravshanov N., Abdullayev Z., Shafiev T.R. Mathematical model and numerical algortm to study the process of aerosol particles distribution in the atmosphere // International Conference on Information Science and Communications Technologies (ICISCT). Ташкент: IEEE, 2019.
11. Равшанов Н., Мурадов Ф.А., Шафиев Т.. Математическая модель и эффективный численный алгоритм для мониторинга и прогнозирования концентрации вредных веществ в атмосфере с учётом физико-механических свойств частиц // Проблемы вычислительной и прикладной математики. 2020. № 5(29). С. 120–140.