

УДК 512.312

## УСОВЕРШЕНСТВОВАННАЯ МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА И ДИФФУЗИИ ВРЕДНЫХ ВЕЩЕСТВ В ПРИЗЕМНОМ ПОГРАНИЧНОМ СЛОЕ АТМОСФЕРЫ

<sup>1</sup>Равшанов Н., <sup>2</sup>Шарипов Д.К., <sup>3</sup>Нарзуллаева Н.

<sup>1</sup>Центр разработки программных продуктов и аппаратно-программных комплексов при Ташкентском университете информационных технологий,  
Ташкент, e-mail: ravshanzade-09@mail.ru

<sup>2</sup>Институт математики при Национальном университете Узбекистана,  
Ташкент, e-mail: qushkor@rambler.ru

<sup>3</sup>Самаркандский филиал Ташкентского университета информационных технологий,  
Самарканд, e-mail: niga\_cool89@mail.ru

В работе приведена математическая модель процесса распространения вредных веществ в пограничном слое атмосферы с учетом рельефа местности и характеристик подстилающей поверхности, описывающие с помощью система дифференциальных уравнений в частных производных и соответствующих им начальные и граничные условия. При разработке модели использованы уравнение движения многокомпонентной воздушной среды, уравнений расчета давления и притока тепла для газа и конденсата. Для определения скоростей перемещения воздушной массы в атмосфере по трем направлениям  $u$ ,  $v$  и  $w$  рассмотрим уравнения гидродинамики – Навье-Стокса, а для вычисления плотности выбрасываемых веществ в атмосфере, учитывая закон сохранения массы к жидкости, протекающей через фиксированный объем использован уравнение неразрывности масс. Для вычисления переноса тепла в многокомпонентной окружающей среде рассмотрены при переноса тепла для газа, а для определения давление пара через температуру, использована уравнение Менделеева-Клапирона. Приведены уравнения описывающие переход воды из жидкого состояния в газообразное и обратно и когда на источнике подается газ, вода в газообразном состоянии, вода и сажа.

**Ключевые слова:** математическая модель, дифференциальное уравнение, рельеф местности, процесс загрязнения, многокомпонентная среда, экология, перенос и диффузия вредных веществ.

## THE MATHEMATICAL MODEL OF THE TRANSPORT AND DIFFUSION OF POLLUTANTS IN THE ATMOSPHERIC BOUNDARY LAYER

<sup>1</sup>Ravshanov N., <sup>2</sup>Sharipov D.K., <sup>3</sup>Narzullaeva N.

<sup>1</sup>Centre for the development of software and hardware-program complexes at Tashkent university of information technologies, Tashkent, e-mail: ravshanzade-09@mail.ru

<sup>2</sup>Institute of Mathematics at National University of Uzbekistan, Tashkent,  
e-mail: qushkor@rambler.ru

<sup>3</sup>Samarkand branch of Tashkent university of information technologies, Samarkand,  
e-mail: niga\_cool89@mail.ru

The paper shows the mathematical model of the spread of harmful substances in the atmospheric boundary layer, taking into account the terrain and the characteristics of the underlying surface, described by means of a system of differential equations in partial derivatives and corresponding initial and boundary conditions. In developing the model used in the equation of motion of a multicomponent air, equations for calculating the pressure and heat flux for gas and condensate. To determine the velocities of the air mass in the atmosphere in three directions and consider the hydrodynamic equations – Navier-Stokes equations, and to compute the density of substances emitted into the atmosphere, taking into account the law of conservation of mass to the fluid flowing through the fixed volume of used mass continuity equation. To calculate the heat transfer in a multicomponent environment considered in the transfer of heat to the gas, and for determining the vapor pressure in terms of temperature, use Equation Mendeleev-Klapirona. The equations describing the transition of water from liquid to gaseous state and vice versa, and when the source gas is supplied, the water in a gaseous state, water and soot.

**Keywords:** mathematical model, differential equation, the terrain, the process of pollution, multicomponent medium, environment, transport and diffusion of pollutants.

### Введение

Бурное развитие отраслей производства, разработка нефте-, газо- и рудных месторождений, обработка сырья и продуктов общего назначения, строительство объектов производства и жилого фонда и т.д. остро ставят проблему охраны окружающей среды.

В результате резкого роста вредных выбросов в промышленных регионах концентрация вредных веществ в атмосфере над ними, зачастую, превышает предельно допустимую санитарную норму. Проблемы, связанные с добычей угля, цветных металлов и других полезных ископаемых приводят к эрозии почвы и загрязнению огром-

ных территорий вторичными материалами и отходами производства, которые служат источником загрязнения воздушного бассейна городов и регионов.

Здесь так же надо отметить, что выбрасываемые газовые примеси под воздействием метеорологических условий подвергаются сложным химическим реакциям, в результате чего образуются новые более токсичные соединения, которых не было в первоначальных выбросах. Особенно вредны выбросы окиси азота и серы, окиси и двуокиси углерода и т.д. Как известно, все выброшенные из промышленных объектов в окружающую среду (приземный слой атмосферы) вредные вещества, в конечном итоге, как материальная субстанция осаждаются на поверхность земли. Причем тяжёлые соединения оседают в основном под действием гравитационного поля, а лёгкие – в результате диффузионного процесса.

Рост антропогенного воздействия на окружающую среду, вызванный интенсивной разработкой недр земли, а так же развитием материального производства, привел к нарушению экологического равновесия как локально – в отдельных районах земного шара, так и глобально – в масштабах планеты в целом. Это особенно заметно в государствах с быстрым ростом производительных мощностей, например, в Индии, Китае, Корее, Сингапуре и т.д. В свою очередь, нарушения экологического баланса влекут распространение раковых, астматических, аллергические и другие заболеваний, сокращение численности многих видов фауны и флоры.

Для исследования, прогнозирования и мониторинга состояния атмосферного бассейна промышленных регионов, а также для оценки воздействия техногенных факторов необходима разработка инструмента, с помощью которого можно решать выше указанные задачи. И здесь, одним из эффективных средств для решения поставленных задач выступает математическое моделирование и вычислительный эксперимент на ЭВМ, которые позволяют дать качественную и количественную оценку экологического состояния окружающей среды рассматриваемого региона.

Для решения этой актуальной проблемы были созданы научные центры и школы под руководством ведущих специалистов, исследующих вопросы охраны окружающей среды, защиты водных ресурсов от внеш-

них техногенных факторов, влияния трансформаций в экосистеме и т.д. Научными школами и центрами по всему миру уже получены значительные результаты теоретического и прикладного характера. Из нижеприведенного обзора следует, что в перечне актуальных задач, решаемых с помощью математического моделирования, экологические проблемы занимают особое место.

В [1-3] разработана кинематическая модель распространения частиц реагента в облаке, описываемая системой квазилинейных дифференциальных уравнений в частных производных параболического типа, осесимметричной струи, характерной для кучево-дождевого облака. Модель учитывает влияние процессов переноса, диффузии, генерации и диссипации на развитие турбулентности. Было исследовано поведение приближенного решения в зависимости от выбранной сетки.

В работе [4] рассмотрена задача моделирования рассеяния газообразных опасных выбросов в атмосфере. Отмечены три основных подхода к моделированию данного процесса: гауссовы модели рассеяния, называемые дисперсионными моделями; модели, основанные на интегральных законах сохранения субстанции; модели, построенные на численном решении системы уравнений сохранения – численное моделирование. Авторами была разработана математическая модель, где рассматриваются следующие процессы: движения облака при переменной скорости ветра по вертикали; гравитационное растекание; рассеяние облака в вертикальном направлении за счет атмосферной турбулентности; нагрев или охлаждение облака вследствие подмешивания воздуха; теплообмен облака с подстилающей поверхностью. Авторы при исследовании процесса переноса и диффузии вредных частиц в атмосфере учитывали изменения массы и внутренней энергии облака и его физические характеристики, а результаты модельных расчетов сравнили с экспериментальными данными.

По результатам проведенных численных расчетов были сделаны следующие выводы: стандартные методики построения на гауссовой модели не способны, с достаточной степенью точности, прогнозировать распространение вредных веществ (тяжелых газов) как от залпового, так и от постоянного источника выбросов вредных веществ в атмосферу.

В статье [5] представлены основные подходы к созданию компьютерных моделей атмосферных явлений. Произведён обзор современных моделей распределения субстанции в атмосфере, фильтров пыли и пыльцы растений и показано преимущество модели SILAM Финского метеорологического института. Физическая сторона рассматриваемой проблемы связана с анализом эмиссии, распространения и поглощения загрязняющих веществ.

В работе [6] показаны существенные факторы, воздействующие на процессы переноса и диффузии вредных веществ: режим циркуляции атмосферы, ее термическая устойчивость; атмосферное давление, влажность воздуха; температурный режим, температурные инверсии, их повторяемость и продолжительность; скорость ветра, повторяемость застоев воздуха и слабых ветров (скоростью до 1 м/с); продолжительность туманов; рельеф местности, геологическое строение и гидрогеология района; почвенно-растительные условия (тип почв, водопроницаемость, пористость, гранулометрический состав почв, состояние растительности, состав пород, возраст, бонитет); фоновые значения показателей загрязнения природных компонентов атмосферы; состояние животного мира.

В работе [7] разработана распределенная автоматизированная система, за счет использования современных информационных технологий позволяющая повысить эффективность исследования и прогнозирования распространения загрязняющих веществ, выбрасываемых химико-технологическими предприятиями в атмосферу промышленного региона.

Работа [8-9] посвящена критическому анализу применимости физико-математических моделей атмосферной диффузии для исследования загрязнения атмосферного воздуха вредными выбросами автомобильного транспорта. Рассматриваются специфические характеристики состава отработавших газов, закономерности их миграции и метаболизма в стратифицированной атмосфере. Демонстрируются карты мониторинга загрязнения атмосферы на примере кольцевой автомагистрали Санкт-Петербурга.

В [10] построена математическая модель для описания нестационарной трехмерной динамики загрязнений, в том числе от нестационарных источников для конкретного задаваемого физического состоя-

ния атмосферы. В предлагаемом подходе используется прямое численное интегрирование точных уравнений переноса примеси в атмосфере с учетом основных физических факторов, что приближает данный метод к проведению вычислительного эксперимента. На основе разработанной математической модели создана информационная система для компьютерного моделирования процесса распространения примесей от промышленных источников, расположенных на территории предприятия. Адекватность моделей процессу проверяется с помощью алгоритмов текущего обнаружения.

В работе [11] проведены аналитические исследования процессов распространения в атмосфере вредных выбросов предприятий. В качестве основного атмосферного загрязнителя рассматривается углекислый газ (CO<sub>2</sub>). В работе приводится функция Грина для задачи о разовом мгновенном выбросе вредной примеси в стандартном приземном слое атмосферы с заданным ветровым полем и получено выражение для концентрации примесей в стационарном случае и при непрерывно действующем источнике загрязнения. Построены уровни равного загрязнения атмосферы и проанализирована их трансформация при изменении параметров источника.

Задача моделирования выбросов газообразных примесей в атмосферу рассмотрена в [12] в новой математической постановке, которая позволяет учесть взаимное влияние разных газодинамических процессов, возникающих при реализации производственных циклов или в результате аварийных ситуаций на промышленных предприятиях.

В работе [13] создана информационная система для математического моделирования процесса переноса и диффузии вредных веществ в атмосфере с использованием прикладного программного обеспечения «ArcGIS», отражающая реальное состояние атмосферного воздуха в местах. Но здесь надо отметить, что в рамках данной системы результаты могут быть получены только в отдельных точках, и они не могут дать адекватной картины состояния воздуха на остальной территории.

Работа [14] посвящена разработке математической модели динамики и кинетики процесса переноса и диффузии газовых и аэрозольных примесей в атмосфере. В работе приведена модель переноса многоком-

понентной 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 в приведено работе [15].

В работе [16] 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 предложена в работе [17], а в качестве численного метода используется SIMPLE-алгоритм.

В работе [18] исследование проводилось на основе разработанных региональных моделей процесса диффузии веществ, описываемой гидро-термодинамическим уравнением, а именно уравнением молекулярной теплопроводности в активном слое почвы с учетом теплового баланса подстилающей поверхности (вода, земля). Разработанная исследователями комплексная математическая модель состоит из отдельных блоков, каждый из которых представляет математическую модель, описывающую гидро-термодинамические процессы в отдельных объектах окружающей среды. Авторами исследуются экологические проблемы, связанные с распределением загрязняющих веществ от известных источников и определяется вероятное местонахождение источника в водной среде.

Процесс переноса и диффузии вредных веществ в атмосфере с учетом различных погодных-климатических факторов и внешних возмущений рассмотрен в работе [19]. В ней были рассмотрены перенос загрязнителей воздуха от источника с учетом адвекции загрязняющих веществ от среднего движения воздуха, смешивание загрязняющих веществ при атмосферной турбулентности и массовой диффузии. Кроме того, приводится исследование процесса при различных физических и математических

аспектах, связанных с транспортом и диффузией загрязнителей воздуха в пограничном слое атмосферы при слабом и сильном ветрах.

Немалый интерес представляет вопрос математического моделирования распространения загрязняющих веществ, транспортируемых с водой. В работе [20] рассмотрена задача, связанная с процессом распространения вредных веществ в окружающую среду и смоделированная в виде совокупности четырех простых моделей: сухопутного потока воды, просачивания, переноса загрязняющих веществ поверхностным стоком и осаждения загрязнителей (накопления) на поверхности земли. Модель опирается с уравнение диффузии с дополнительными слагаемыми в правой части. В разработанной математической модели процесса учитываются влияние рельефа местности, литологического строения территории и интенсивность загрязнения от скорости поглощения земляной поверхности. Форма, границы и топология области решения задача изменяется со временем, в зависимости от появления сухих «островков», окруженных водой.

Работа [21] посвящена процессу дисперсии и диффузии химически активных первичных загрязняющих веществ, выбрасываемых из повышенных линейных источников в стабильный пограничный слой атмосферы с обобщенной скоростью ветра и квадратичной функцией вертикальной высоты. Для данной постановки получено точное решение с помощью преобразования Лапласа для линейных источников в пограничном слое атмосферы. В нем учитывалась химическая реакция, происходящая в результате взаимодействия с воздушной массой, а так же превращение газообразных загрязнителей в твердые частицы и их осаждение на поверхности рассматриваемой местности.

В работах [22-26] разработано математическое обеспечение для решения задачи движения многокомпонентной воздушной среды с учетом переноса и диффузии вредных веществ в атмосфере, изменения теплового режима атмосферы, фазового перехода, а также влияния растительного покрова.

Работа [27] посвящена транспорту вредных веществ воздушном потоке в приземном слое атмосферы на большие и средние расстояния.

Анализ указанных источников показал, что в исследованиях авторов не рассмотрен

процесс переноса и диффузий многокомпонентных вредных веществ в атмосфере, когда существенную роль играют скорость перемещения воздушной массы атмосферы по трем направлениям  $u$ ,  $v$  и  $w$ , рельеф местности рассматриваемого промышленного региона, теплообмен между жидкой и газообразной фазами, изменения их плотности и температуры, которые изменяются по суткам и по временам года.

Также следует отметить, что при математическом моделировании процесса распространения вредных веществ в атмосфере в работах многих авторов предполагается, что распространение вредных веществ, выброшенных из источников, не достигает рассматриваемых границ области решения задачи и отсутствует приток и отток вредных веществ через них.

В настоящей работе при исследовании процесса переноса и диффузии вредных ве-

ществ 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 атмосфере.

### Постановка задачи

Для моделирования процесса переноса и диффузии вредных веществ в атмосфере, опираясь на основные законы гидротермодинамики и гидромеханики процесса, получим уравнение транспорт вредных веществ в атмосфере, в котором учитываются скорости движения воздушной массы, рельефа местности, коэффициентов диффузии и турбулентности, скорость осаждения вредных веществ на поверхности земли и коэффициент поглощения вредных веществ в атмосфере:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial t} + u \frac{\partial h\theta}{\partial x} + v \frac{\partial h\theta}{\partial y} + (w - w_g) \frac{\partial h\theta}{\partial z} + h\sigma\theta = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu h \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) + \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu h \frac{\partial \theta}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \eta h \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) + \delta_{i,j,k} I, \end{aligned} \quad (1)$$

Принимая во внимание агрегатное состояние выбрасываемых вредных смесей в атмосфере, запишем уравнения описывающие переход воды из жидкого состояния в газообразное и обратно [1-2]:

- когда на источнике подается газ

$$\frac{\partial \theta_1}{\partial t} + u \frac{\partial h\theta_1}{\partial x} + v \frac{\partial h\theta_1}{\partial y} + w \frac{\partial h\theta_1}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu h \frac{\partial \theta_1}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu h \frac{\partial \theta_1}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \eta h \frac{\partial \theta_1}{\partial z} \right) + \delta_{i,j,k} I_1; \quad (2)$$

- когда на источнике подается вода в газообразном состоянии

$$\frac{\partial \theta_2}{\partial t} + u \frac{\partial h\theta_2}{\partial x} + v \frac{\partial h\theta_2}{\partial y} + w \frac{\partial h\theta_2}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu h \frac{\partial \theta_2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu h \frac{\partial \theta_2}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \eta h \frac{\partial \theta_2}{\partial z} \right) + \delta_{i,j,k} I_2 + \frac{v_g}{\rho_p}; \quad (3)$$

- когда на источнике подается вода

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta_3}{\partial t} + u \frac{\partial h\theta_3}{\partial x} + v \frac{\partial h\theta_3}{\partial y} + (w - w_g) \frac{\partial h\theta_3}{\partial z} + h\sigma_1\theta_3 = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu h \frac{\partial \theta_3}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu h \frac{\partial \theta_3}{\partial y} \right) + \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left( \eta h \frac{\partial \theta_3}{\partial z} \right) + \delta_{i,j,k} I_3 - \frac{v_g}{\rho_p}; \end{aligned} \quad (4)$$

- и когда на источнике подается сажа

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta_4}{\partial t} + u \frac{\partial h\theta_4}{\partial x} + v \frac{\partial h\theta_4}{\partial y} + (w - w_g) \frac{\partial h\theta_4}{\partial z} + h\sigma_2\theta_4 = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu h \frac{\partial \theta_4}{\partial x} \right) + \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu h \frac{\partial \theta_4}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \eta h \frac{\partial \theta_4}{\partial z} \right) + \delta_{i,j,k} I_4. \end{aligned} \quad (5)$$

Для определения концентрации вредных веществ в атмосфере в зависимости от орографии местности и погодных-климатических факторов необходимо задать начальное и граничное условия:

$$\theta_i(x, y, z) = \theta_{i,H}(x, y, z) \text{ при } t = 0 \quad (6)$$

$$\left. \begin{aligned} \alpha_1 \mu \frac{\partial \theta_i}{\partial x} \Big|_{x=0} &= \alpha_2 (\theta_i - \theta_{i,H}), \quad \beta_1 \mu \frac{\partial \theta_i}{\partial x} \Big|_{x=L_x} = \beta_2 (\theta_i - \theta_{i,H}), \\ \alpha_3 \mu \frac{\partial \theta_i}{\partial y} \Big|_{y=0} &= \alpha_4 (\theta_i - \theta_{i,H}), \quad \beta_3 \mu \frac{\partial \theta_i}{\partial y} \Big|_{y=L_y} = \beta_4 (\theta_i - \theta_{i,H}), \\ \frac{\partial \theta_i}{\partial z} \Big|_{z=0} &= \xi \theta_i - \tilde{f}, \quad \frac{\partial \theta_i}{\partial z} \Big|_{z=L_z} = 0, \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

где  $i=1, 2, 3, 4$ .

Здесь  $\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4, \theta_{i,H}$  – соответственно концентрация выброшенных вредных веществ в виде воды в газообразном состоянии, газ на источнике, вода в жидком состоянии, сажа и их в первоначальные значения в атмосфере;  $u, v, w$  – скорость ветра по трем направлениям;  $v_g = f(\rho_n - \rho_1)$  – массовая скорость испарения;  $\rho_n$  – плотность насыщенных паров;  $\mu$  – коэффициент диффузии;  $\eta$  – коэффициент турбулентности;  $\xi$  – коэффициент взаимодействия с подстилающей поверхности земли;  $h$  – функция, описывающая орографическую поверхность земли;  $I_1, I_2, I_3, I_4$  – мощность источников выбросов в атмосферу соответственно для вредного газа, воды в газообразной форме, воды в жидком состоянии и сажи;  $f$  – источник выброса вредных

веществ из поселяющей поверхности земли;  $\sigma_1, \sigma_2$  – коэффициенты поглощения вредных веществ в атмосфере (вода в жидкой форме и сажа);  $\delta_{i,j,k}$  – функция Дирака;  $w_g$  – скорость осаждения вредных частиц;  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4$  принимает значение 0 или 1 в зависимости от постановка задача.

Из постановки задачи (1)-(7) следует, что для ее численного интегрирования необходимо вычислить скорость перемещения воздушной массы атмосферы по трем направлениям, соответственно, по  $u, v$  и  $w$ .

#### Метод решения

Для определения скоростей перемещения воздушной массы в атмосфере по трем направлениям  $u, v$  и  $w$  рассмотрим уравнения гидродинамики – Навье-Стокса:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \eta \frac{\partial u}{\partial z} \right) - g_x, \quad (8)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \eta \frac{\partial v}{\partial z} \right) - g_y, \quad (9)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial w}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \eta \frac{\partial w}{\partial z} \right) - g_z, \quad (10)$$

с начальными и граничными условиями

$$u(x, y, z) \Big|_{t=0} = \dot{u}_0(x, y, z); \quad v(x, y, z) \Big|_{t=0} = \dot{v}_0(x, y, z); \quad w(x, y, z) \Big|_{t=0} = \dot{w}_0(x, y, z), \quad (11)$$

$$\left. \begin{aligned} \alpha_5 \mu \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=0} &= \alpha_6 (u - \dot{u}_0), & \beta_5 \mu \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=L_x} &= \alpha_6 (u - \dot{u}_0), \\ \alpha_7 \mu \frac{\partial v}{\partial y} \Big|_{y=0} &= \alpha_8 (v - \dot{v}_0), & \beta_7 \mu \frac{\partial v}{\partial y} \Big|_{y=L_y} &= \alpha_8 (v - \dot{v}_0), \\ \eta \frac{\partial w}{\partial z} \Big|_{z=0} &= 0, & \eta \frac{\partial w}{\partial z} \Big|_{z=L_z} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

Здесь  $P$  – давление;  $g_{(x,y,z)}$  – проекция компонентов ускорения свободного падения.

Для вычисления плотности выбрасываемых веществ в атмосферу, учитывая закон сохранения массы к жидкости, протекающей через фиксированный объем получим уравнение неразрывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial \rho}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k \frac{\partial \rho}{\partial z} \right) + I_g \quad (13)$$

с соответствующими начальными и граничными условиями:  $\rho(x, y, z) \Big|_{t=0} = \rho_c$ ,

$$\left. \begin{aligned} \alpha_9 \rho \mu \frac{\partial \rho}{\partial x} \Big|_{x=0} &= \alpha_{10} (\rho - \rho_0), & \beta_9 \rho \mu \frac{\partial \rho}{\partial x} \Big|_{x=L_x} &= \beta_{10} (\rho - \rho_0), \\ \alpha_{11} \rho \mu \frac{\partial \rho}{\partial y} \Big|_{y=0} &= \alpha_{12} (\rho - \rho_0), & \beta_{11} \rho \mu \frac{\partial \rho}{\partial y} \Big|_{y=L_y} &= \beta_{12} (\rho - \rho_0), \\ \frac{\partial \rho}{\partial z} \Big|_{z=0} &= 0, & \frac{\partial \rho}{\partial z} \Big|_{z=L_z} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

Так как выбрасываемые примеси в окружающую среду обладают определенной температурой, играющей существенную роль при распространении вредных веществ в атмосфере, то учет данного фактора является необходимым. Уравнение, описывающее процессы переноса и диффузии тепла и теплообмена с окружающей средой имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} + v \frac{\partial \Phi}{\partial y} - w_g \frac{\partial \Phi}{\partial z} = \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) + \\ & + \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \delta_{i,j,k} I_T. \end{aligned} \quad (15)$$

Здесь  $\Phi$  – тепловая энергия;  $w_g$  – скорость осаждения взвешенных частиц;  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности;  $I_T$  – функция, описывающая распределение и мощность источника тепла.

Так как мы рассматриваем процесс распространения многокомпонентной среды, то для коэффициента теплопроводности и тепловой энергии справедливо соотношение

$$\Phi = \sum_{i=1}^L \Phi_i \theta_i = \sum_{i=1}^L \rho_i c_i \theta_i T_i.$$

В нашей постановке для задачи переноса тепла в многокомпонентной окружающей среде можно рассмотреть случаи:

- переноса тепла для газа

$$R_1 \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( R_2 \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( R_2 \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( R_2 \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \bar{q}_2 v_g - \alpha_v (T - T_s), \quad (15)$$

где  $R_1 = \sum_{i=1}^2 \rho_i c_{\rho} \theta_i$ ;  $R_2 = \sum_{i=1}^2 (\rho_i c_{\rho} \mu + \lambda_i) \theta_i$ ;

$v_g$  – массовая скорость испарения;

$\rho$ ,  $c_{\rho}$  – плотность и теплоемкость газовой фазы;

$q$  – удельная теплота преобразования,

$T$ ,  $T_s$  – температура газовой и конденсированной фаз;

$\alpha_v$  – коэффициент теплопередачи;

- переноса тепла для конденсата

$$R_3 \left( \frac{\partial T}{\partial t} - w_0 \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left( (R_3 \mu) \frac{\partial T_s}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( (R_3 \mu) \frac{\partial T_s}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( (R_3 \mu) \frac{\partial T_s}{\partial z} \right) - \alpha_v (T - T_s), \quad (16)$$

где  $R_3 = \sum_{i=3}^4 (\rho_i c_{\rho_i} \theta_i)$ ;

$c_{\rho_i}$ ,  $\theta_i$ ,  $\rho_i$  – удельные теплоемкость, объемные доли  $i$ -ой фазы и истинные плотности;

$T$ ,  $T_s$  – температура газовой и конденсированной фаз.

Для решения (15)-(16) задаем начальное и граничное условия:

$$T(x, y, z) = T_0(x, y, z); \quad (17)$$

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{13} k_1 \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} &= \alpha_{14} (T - T_0), & \beta_{13} k_1 \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=L_x} &= \beta_{14} (T - T_0), \\ \alpha_{15} k_1 \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=0} &= \alpha_{16} (T - T_0), & \beta_{15} k_1 \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=L_y} &= \beta_{16} (T - T_0), \\ \alpha_{17} k_1 \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=0} &= \alpha_{18} (T - T_0), & \beta_{17} k_1 \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=L_z} &= \beta_{18} (T - T_0). \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

Чтобы определить давление пара через температуру, используем уравнение Менделеева-Клапейрона, и продифференцируя получим

$$\frac{\rho}{P} \frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\rho}{T} \frac{\partial T}{\partial t}. \quad (19)$$

Здесь  $\rho_i$ ,  $R$ ,  $M$  – плотность, универсальная газовая постоянная, молярная масса;  $k_1$  – коэффициент теплопроводности.

В уравнениях (2)-(18) в зависимости от постановки задачи  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4, \alpha_5, \alpha_6, \alpha_7, \alpha_8, \beta_5, \beta_6, \beta_7, \beta_8, \alpha_9, \alpha_{10}, \alpha_{11}, \alpha_{12}, \beta_9, \beta_{10}, \beta_{11}, \beta_{12}, \alpha_{13}, \alpha_{13}, \alpha_{14}, \alpha_{15}, \beta_{13}, \beta_{14}, \beta_{15}, \beta_{16}, \alpha_{16}, \alpha_{17}, \alpha_{18}, \beta_{16}, \beta_{17}, \beta_{18}$  могут принимать значение 0 или 1.

Для решения уравнения (8)-(12) осуществляем расщепление по физическим параметрам, и получим три задачи, где первую можно записать в разностном аналоге:

$$\left. \begin{aligned} \frac{u^{n+1/3} - u^n}{\Delta t / 3} + \left( u \frac{\partial u}{\partial x} \right)^{n+1/3} + \left( v \frac{\partial u}{\partial y} \right)^{n+1/3} + \left( w \frac{\partial u}{\partial z} \right)^{n+1/3} &= -G_x, \\ \frac{v^{n+1/3} - v^n}{\Delta t / 3} + \left( u \frac{\partial v}{\partial x} \right)^{n+1/3} + \left( v \frac{\partial v}{\partial y} \right)^{n+1/3} + \left( w \frac{\partial v}{\partial z} \right)^{n+1/3} &= -G_y, \\ \frac{w^{n+1/3} - w^n}{\Delta t / 3} + \left( u \frac{\partial w}{\partial x} \right)^{n+1/3} + \left( v \frac{\partial w}{\partial y} \right)^{n+1/3} + \left( w \frac{\partial w}{\partial z} \right)^{n+1/3} &= -G_z, \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

вторую

$$\left. \begin{aligned} \frac{u^{n+2/3} - u^{n+1/3}}{\Delta t / 3} &= \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right)^{n+2/3} + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right)^{n+2/3} + \frac{\partial}{\partial z} \left( k_0 \frac{\partial u}{\partial z} \right)^{n+2/3}, \\ \frac{v^{n+2/3} - v^{n+1/3}}{\Delta t / 3} &= \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right)^{n+2/3} + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial v}{\partial y} \right)^{n+2/3} + \frac{\partial}{\partial z} \left( k_0 \frac{\partial v}{\partial z} \right)^{n+2/3}, \\ \frac{w^{n+2/3} - w^{n+1/3}}{\Delta t / 3} &= \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial w}{\partial x} \right)^{n+2/3} + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial w}{\partial y} \right)^{n+2/3} + \frac{\partial}{\partial z} \left( k_0 \frac{\partial w}{\partial z} \right)^{n+2/3}, \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

третью

$$\left. \begin{aligned} \frac{u^{n+1} - u^{n+2/3}}{\Delta t / 3} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x}, \\ \frac{v^{n+1} - v^{n+2/3}}{\Delta t / 3} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y}, \\ \frac{w^{n+1} - w^{n+2/3}}{\Delta t / 3} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z}. \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

Здесь  $k_0$  – коэффициент турбулентного обмена.

Далее умножая систему уравнений (22) на  $\rho \Delta t / 3$  и дифференцируя по переменным  $x, y, z$  соответственно, в конечном итоге получим

$$\left. \begin{aligned} \left( \rho \frac{\partial u}{\partial x} \right)^{n+1} &= \left( \rho \frac{\partial u}{\partial x} \right)^{n+2/3} - \Delta t / 3 \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}, \\ \left( \rho \frac{\partial v}{\partial y} \right)^{n+1} &= \left( \rho \frac{\partial v}{\partial y} \right)^{n+2/3} - \Delta t / 3 \frac{\partial^2 P}{\partial y^2}, \\ \left( \rho \frac{\partial w}{\partial z} \right)^{n+1} &= \left( \rho \frac{\partial w}{\partial z} \right)^{n+2/3} - \Delta t / 3 \frac{\partial^2 P}{\partial z^2}. \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

Подставляя систему (23) в (13) получим следующее:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \left( \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \right)^{n+2/3} - \Delta t / 3 \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \left( \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \right)^{n+2/3} - \Delta t / 3 \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} + \left( \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \right)^{n+2/3} - \Delta t / 3 \frac{\partial^2 P}{\partial z^2} = \\ = \left( \mu \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \right) + \left( \mu \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2} \right) + \left( k_0 \frac{\partial^2 \rho}{\partial z^2} \right) + I_g; \end{aligned}$$

Используя уравнение состояния (19), получим уравнение для вычисления поля давления:

$$\left(\frac{\rho}{P} \frac{\partial P}{\partial t}\right) = \Delta t / 3 \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \Delta t / 3 \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} + \Delta t / 3 \frac{\partial^2 P}{\partial z^2} - \frac{\rho}{T} \frac{\partial T}{\partial t} -$$

$$-\left(\rho \frac{\partial u}{\partial x}\right)^{n+2/3} - \left(\rho \frac{\partial u}{\partial y}\right)^{n+2/3} - \left(\rho \frac{\partial w}{\partial z}\right)^{n+2/3} + \left(\mu \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}\right) + \left(\mu \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2}\right) + \left(k_0 \frac{\partial^2 \rho}{\partial z^2}\right) + I_g. \quad (24)$$

С помощью (24) можно вычислить поля распределения давления в рассматриваемом слое атмосферы.

Таким образом, в настоящей статье была разработана трехмерная математическая модель процесса распространения вредных веществ в пограничном слое атмосферы с учетом рельефа местности и характеристик подстилающей поверхности. При разработке данной модели были использованы: уравнение движения многокомпонентной воздушной среды, модель расчета давления, модель притока тепла, которая описывается уравнениями теплопроводности газа и конденсата. С помощью приведенной модели можно вычислить основные показатели и параметры, воздействующие на процесс переноса и диффузии вредных многокомпонентных смесей, выбрасываемых из промышленных объектов, строительных площадок, а также из осушенных частей морей и озер.

### Выводы

Разработаны математические модели переноса и диффузии вредных веществ в виде воды, газа и сажа в многокомпонентной воздушной среде, которые учитывают такие факторы, как переход воды из жидкого в газообразное состояние, турбулентный обмен, конвективное движение, осаждение субстанций, теплообмен между жидкими и газообразными состояниями и переменную плотность и температуру, а также учет рельефа местности который существенно влияет на динамически изменяющийся состояния объект исследования.

При разработки математической модели процесса распространения вредных веществ в атмосфере выведен уравнение для расчета поля давлений, которое учитывает сжимаемость среды, тепловое расширение, турбулентное перемешивание воздушной массы атмосферы.

Особенностью разработанной математической модели переноса и диффузии вредных веществ в пограничном слое ат-

мосферы и движения воздушной среды связано с учетом турбулентного перемешивания в уравнении неразрывности среды, а также учет влияния орографической поверхности земли растительного покрова на распространение аэрозольных частиц в атмосфере.

В разработанной математической модели процесса учитывается перенос и диффузия вредных компонентов через границы раздела области решения задачи, с помощью граничное условие третьего рода, который соответствует реальную физическую природу рассматриваемого процесса.

Разработанная математическая модель с учетом указанных выше факторов более адекватно описывает процесс по сравнению с другими известными моделями предложенные другими авторами.

### Список литературы

1. Корчагин П.В. Математическое моделирование нестационарной турбулентной диффузии при помощи метода конечных элементов // Вузовская наука – Северо-Кавказскому региону: материалы III регион. конф. – Ставрополь: СевКавГТУ, 1999. – С. 7.
2. Корчагин П.В. Построение вычислительной схемы для уравнения переноса с использованием метода взвешенной невязки и метода конечных элементов // Математическое моделирование в научных исследованиях: тр. Всерос. науч. конф. – Ставрополь: СГУ, 2000. – С. 55-58.
3. Корчагин П.В. Моделирование совместного распространения реагирующих веществ // Студенческая наука – экономике России: материалы III межрегион. конф. – Ставрополь: СевКавГТУ, 2002. – С. 4-5.
4. Лисанов М.В., Пчельников А.В., Сумской С.И. Моделирование рассеяния выбросов опасных веществ в атмосфере // Российский химический журнал общества им. Д.И. Менделеева. – 2005. – Т. 59. – № 4. – С. 18-28.
5. Современные компьютерные модели распространения загрязняющих веществ в атмосфере / А.Б. Белихов, Д.Л. Леготин, А.К. Сухов // Вестник Костромского государственного университета им. Н.А. Некрасова. – 2013. – Т. 19. – № 1. – С. 14-19.
6. Берлянд М.Е. Современные проблемы атмосферной диффузии и загрязнения атмосферы. – Л.: Гидрометеоздат, 1975. – 448 с.
7. Волков В.Ю., Аббас С.Б. Автоматизированная система поддержки проведения исследований распространения выбросов загрязняющих веществ в атмосфере // Известия Тульского государственного университета. Сер. Технические науки. – 2013. – Вып. 2. – С. 54-58.
8. Ложкин В.Н., Медейко В.В. Модели оценки экологического ущерба, применяемые в Российской Федерации, США и странах ЕС, при государственном регулировании

- воздействия транспортных средств на окружающую среду // Вопросы охраны атмосферы от загрязнения: информационный бюллетень. – СПб., 2005. – № 2 (32). – С. 103-116.
9. Uliasz M., Stocker R.A., Pielke R.A. Regional modelling of air pollution transport in the south-western USA // Environmental Modelling Vol. III Comput. Mech. Public. – 1996. – 34 p.
10. Информационно-компьютерный комплекс для моделирования динамики примесей от предприятий химической промышленности / А.А. Белослудцев, Д.В. Гусаров, М.А. Еремин, Н.М. Кузьмин, А.В. Хоперсков, С.С. Храпов // Вестник Волгоградского государственного университета. Сер. Математика. Физика. – 2009. – Вып. 12. – С. 24-31.
11. Chernyavskiy S Mathematical model of process of distribution of gas pollutants in the atmosphere under different weather conditions // Технические науки – от теории к практике: тр. XX Междунар. заочной науч.-практ. конф. – Новосибирск, 2013. – С. 17-22.
12. Скоб Ю.А. Математическое моделирование выброса и рассеяния в атмосфере газообразных примесей // Вестник Харьковского национального университета. Сер. Математическое моделирование. Автоматизация системы управления. – 2007. – № 775. – С. 236-245.
13. Смирнов Е.А. Информационная система для моделирования распространения загрязнения атмосферного воздуха с использованием ArcGIS // Актуальные вопросы технических наук: материалы междунар. науч. конф. – Пермь, 2011. – С. 27-31.
14. Алоян А.Е. Динамика и кинетика газовых примесей и аэрозоль в атмосфере. – М.: ИВМ РАН, 2002. – 201 с.
15. Чуб А.И. Математическая модель оптимизационной задачи размещения пожароопасных объектов с учетом рельефа области размещения // Радиоэлектроника, информатика, управления выпуск. – 2013. – № 1. – С. 88-93.
16. 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. Технич. науки. – 2009. – № 2. – Том 91. – С. 8-14.
17. 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.
18. 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. – P. 181-193.
19. Sharan M., Gopalakrishnan S.G. Mathematical modeling of diffusion and transport of pollutants in the atmospheric boundary layer // January pure and applied geophysics. – 2003. – Vol. 160. – Issue 1-2. – P. 357-394.
20. Mathematical modeling of the pollutants overland flow and transport / V.G. Gitis, E.N. Petrova, S.A. Pirogov, E.F. Yurkov // Автоматика и телемеханика. – 2007. – Vol. 68. – Issue 9. – P. 1643-1653.
21. Khan Y., Shekhu M., Sulochana C. Mathematical model for dispersion and diffusion of chemically reactive pollutants from various sources into a boundary layer with dry deposition // Engineering Computations. – 2013. – Vol. 30. – Issue 5. – P. 707-727.
22. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Хачунц Д.С. Математическое моделирование движения многокомпонентной воздушной среды и транспорта загрязняющих веществ // Известия Южного федерального университета. Технические науки. – 2011. – № 8. – С. 73-79.
23. Чистяков А.Е., Хачунц Д.С. Задача движения многокомпонентной воздушной среды с учетом парообразования и конденсации // Известия Южного федерального университета. Технические науки. – 2013. – № 4. – С. 87-98.
24. Сухинов А.И., Хачунц Д.С. Программная реализация двумерной задачи движения воздушной среды // Известия Южного федерального университета. Технические науки. – 2013. – № 4. – С. 15-20.
25. Чистяков А.Е. Трехмерная модель движения водной среды в Азовском море с учетом транспорта солей и тепла // Известия Южного федерального университета. Технические науки. – 2009. – № 8. – С. 75-82.
26. 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. – P. 35-39.
27. Равшанов Н., Шарипов Д.К., Ахмедов Д. Моделирование процесса загрязнения окружающей среды с учетом рельефа местности погодно-климатических факторов // Информационные технологии моделирования и управления. – Воронеж, 2015. – № 3. – С. 222-235.
28. Anderson G.E. Musicales influences on wind fields // Appl. Meteor. – 1971. – № 10. – P. 377-386.