

## **Лабораторная работа №4.**

### **Математическая модель динамики примесей**

Опишем математическую модель, лежащую в основе пакета компьютерных программ, предназначенного для моделирования динамики загрязняющих примесей в приземном слое атмосферы на территории Светлоярского района от источников Южного промышленного узла г. Волгограда. Имитационная (компьютерная) модель представляет собой реализованную на ЭВМ комплексную модель сложной природной системы, предназначенную для получения информации о поведении этой системы путем проведения машинных экспериментов. Имитационная модель позволяет изучать ситуации, которые в естественных условиях привели бы к тяжелейшим последствиям.

#### **2.2.1. Перенос примесей в приземном слое атмосферы**

Проблема оценки уровня загрязнения нижних слоев атмосферы и подстилающей поверхности является одной из центральных в экологии промышленных районов. Теоретические исследования, основанные, как правило, на численном решении модельных уравнений и статистическом анализе, позволяют во многих случаях дать приемлемые прогнозы распределения концентраций примесей [1-4]. Решающую роль (помимо величины выбросов промышленными предприятиями, транспортом и т.п.) играют рельеф местности и метеорологические факторы — скорость и направление ветра, температура и влажность воздуха, конвективное состояние атмосферы и т.д.

Сложность исследования динамики распространения пассивных (не испытывающих превращений) примесей связана с многомерностью, неоднородностью и нестационарностью изучаемых систем. Для реального прогнозирования необходимо исходить из трехмерной модели, что связано не только с рельефом местности и городскими застройками, но и с взаимообменом подстилающей поверхности, приземного слоя атмосферы и более высоких слоев атмосферы за счет конвективного переноса. Неоднородность системы, которая обусловлена зависимостью различных параметров атмосферы (ветра  $\vec{C}$ , коэффициентов турбулентной диффузии  $D_{ij}$ , температуры и т.д.) в первую очередь

от вертикальной z-координаты, является дополнительным усложняющим фактором [3,5,7].

Возможная нестационарность обусловлена флуктуациями ветра и временной зависимостью функции источников  $Q(\vec{r}, t)$ , что актуально для изучения последствий аварий, выбросов, газовок и т.п. Достаточно сложными могут быть сами источники, например, пространственно распределенные — транспортные коммуникации, пруды-отстойники.

На процесс распространения примесей в атмосфере оказывают влияние множество факторов, но основными являются два: ветровой снос и диффузионное расплывание. Эти два физических эффекта можно учесть в рамках математической модели, в основе которой лежит квазилинейное дифференциальное уравнение в частных производных:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\vec{\nabla}[\vec{C}(\vec{r}, t) \rho] + \vec{\nabla}(D(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \rho) + Q(\vec{r}, t) - \alpha(\vec{r}, t) \rho, \quad (2.1)$$

где  $t$  — время,  $\vec{r}$  — радиус-вектор,  $\rho$  — плотность примеси,  $\vec{C}$  — вектор скорости ветра,  $\vec{D}(\vec{r}, t)$  — тензор турбулентной диффузии,  $Q(\vec{r}, t)$  — совокупность источников и стоков рассматриваемой примеси,  $\alpha$  — параметр, описывающий “вымывание” примеси из атмосферы за счет различных факторов,  $\vec{\nabla} = (\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)$  — дифференциальный векторный оператор набла. Источники загрязнения определяются функцией  $Q$ , которая определяет временную динамику выбросов, их параметры (координаты и мощность выбросов, высоту труб, температуру; для плоскостных источников задается пространственное распределение загрязнителей). Уравнение (2.1) записано в векторной форме. Для решения задачи распространения примеси в приземном слое атмосферы удобно работать в декартовой системе координат:  $x$  и  $y$  — координаты в плоскости поверхности земли, а  $z$  — вертикальная координата (рис.2.1). Слагаемое  $\partial \rho / \partial t$  описывает изменение концентрации примесей со временем в точке с координатами  $(x, y, z)$ .

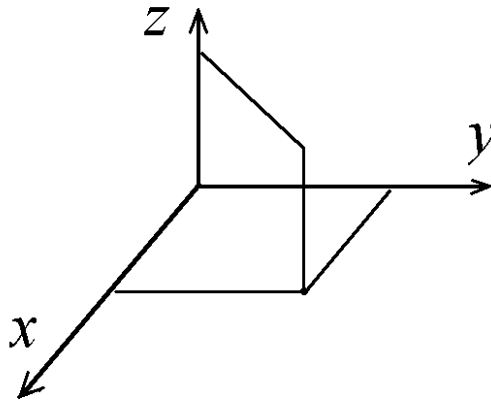


Рис. 2.1. К вопросу о выборе системы координат

Решение уравнения типа (2.1) для сколько-нибудь реальной системы можно построить только с использованием численного алгоритма на ЭВМ [4]. Следует отметить два основных подхода: основанный на использовании различных эйлеровых конечноразностных схем [3,5] и метода статистических испытаний [6-8]. Численная схема, лежащая в основе данной работы описана в п.2.1.8.

### 2.2.2. Диффузионный перенос

Величины  $D$  и  $C$  являются эмпирическими параметрами, учитывающими как состояние атмосферы, так и рельеф местности. Характер функциональной зависимости коэффициента диффузии и скорости ветра в работах различных авторов принимается приблизительно одинаковым. Можно считать, что коэффициент диффузии  $D$  на небольших высотах линейным образом зависит от величины скорости ветра [20], не обращаясь, однако, в нуль при  $|\vec{C}| = 0$ . Поэтому в нашей модели принято

$$D = \begin{cases} D_{\min} |\vec{C}| / C_{\min} & \text{при } |\vec{C}| \geq C_{\min} \\ D_{\min} & \text{при } |\vec{C}| < C_{\min} \end{cases}.$$

В тропосфере коэффициент турбулентной диффузии составляет  $D = 3 \cdot 10^5$  см<sup>2</sup>/с. В зоне перемешивания для коэффициента диффузии [2,9]:

$$D(z, C) = D_1 \cdot \left( 1 + D_0 \cdot z \cdot \exp \left\{ -4.0 \frac{z}{z_p} \right\} \right) \cdot (C(z) + 1), \quad (2.2)$$

здесь  $D(z, C) = D_1 \cdot (C(0) + 1)$  — коэффициент диффузии у земли;  $z_p$  — высота пограничного слоя.

На рис.2.2 показана зависимость коэффициента диффузии от высоты при типичных значениях параметров ( $D_0 = 0.1, 0.01 \text{ м}^{-1}$ ,  $z_p = 50, 150 \text{ м}$ ,  $z_0 = 5 \text{ м}$ ,  $C_g = 3 \text{ м/с}$ ). При  $z \gg z_p$  коэффициент диффузии очень слабо зависит от вертикальной координаты и изменения обусловлены только вертикальным распределением скорости ветра [13]. Значения параметров  $D_0$ ,  $z_p$  сказываются только на высотах  $z < (2-3) z_p$ . Данная диффузионная модель отвечает общим физическим представлениям и многократно проверялась экспериментально [2,9].

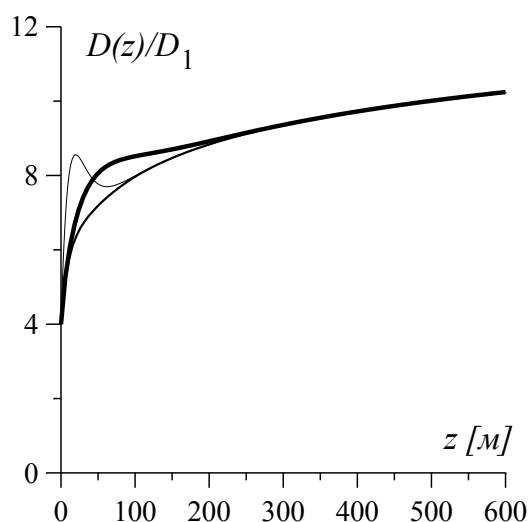


Рис. 2.2. Вертикальная зависимость коэффициента диффузии

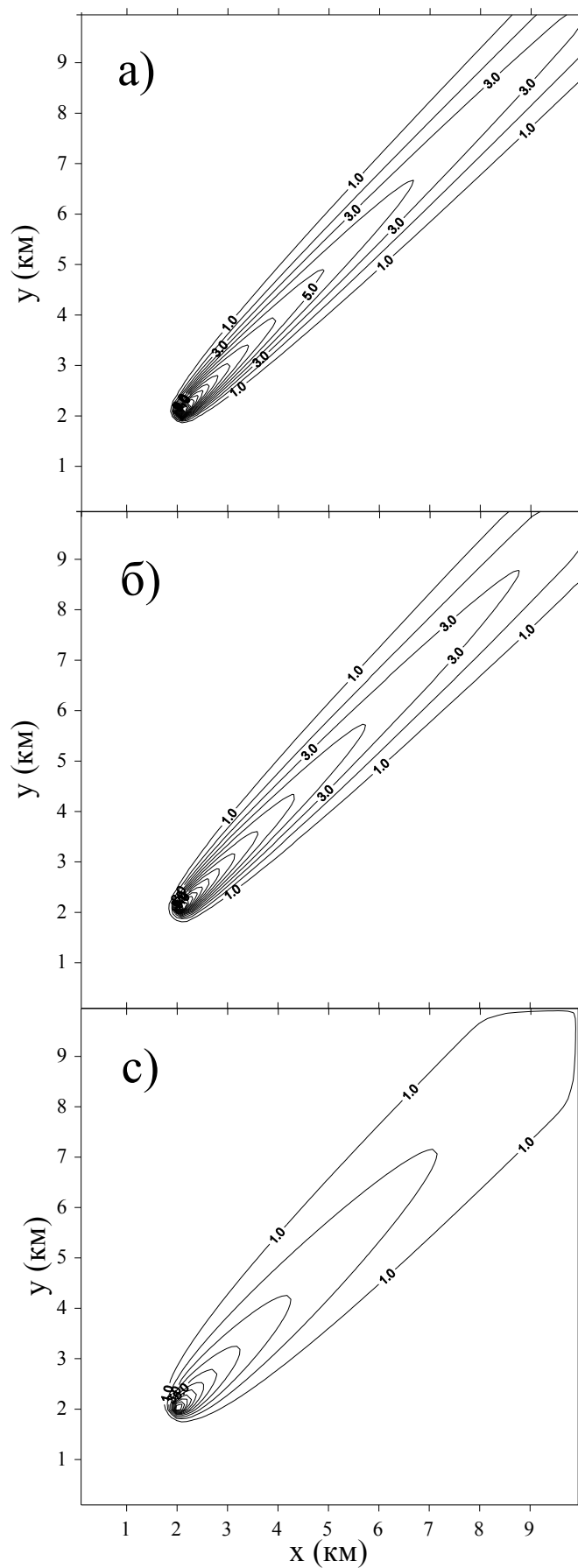


Рис.2.3. Пространственное распределение примеси в столбе атмосферы на единичной площади при различных значениях диффузии и скорости ветра 2 м/с

### 2.2.3. Ветровой перенос

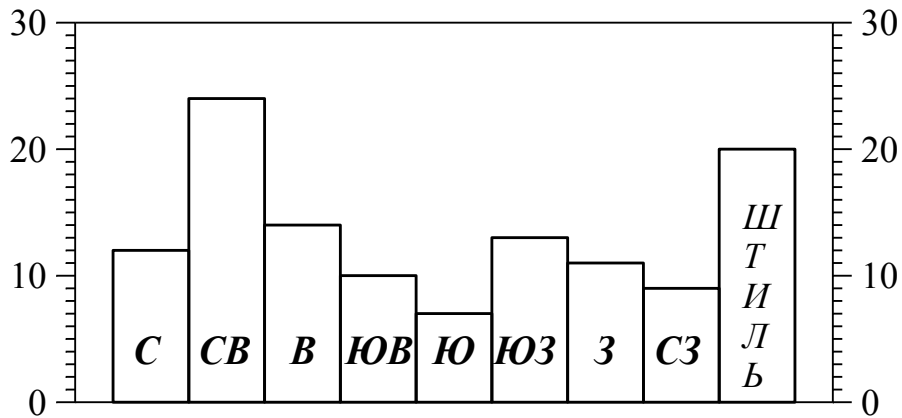


Рис. 2.4. Среднегодовая роза ветров (%)

Для г. Волгограда и Светлоярского района характерно преобладание континентальных воздушных масс [21]. Основным фактором формирования ветрового режима является пространственное распределение атмосферного давления. Преобладающим направлением являются северные направления ветра. В тоже время имеются сезонные перераспределения направлений.

В зависимости от стратификации атмосферы высота эффективного перемешивания в вертикальном направлении может сильно меняться в пределах 100 м до 1000 м.

#### Флуктуации направлений ветра и штиль.

Первое слагаемое справа в (2.1) обусловлено ветром в плоскости земли  $\vec{C} = (C_x, C_y)$ :

$$\vec{C} = \vec{C}_0 + \vec{C}_1, \quad (2.3)$$

где необходимо учитывать наряду с постоянной составляющей  $\vec{C}_0$  и флуктуирующую часть  $\vec{C}_1$ . Среднее направление ветра в каждой точке плоскости (x, y) характеризуется углом  $\varphi_0$  между осью x и направлением ветра, а дисперсия направлений задается параметром  $\sigma_\varphi$ . Тогда при нормальном распределении направлений ветра

$$p(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_\varphi} \exp(-(\varphi - \varphi_0)^2 / 2\sigma_\varphi^2). \quad (2.4)$$

Вычисление истинного направления в каждый момент времени можно легко смоделировать с помощью стандартного алгоритма генерации случайных чисел. Аналогичным образом моделируются и флуктуации величины  $|\vec{C}|$  — скорости ветра.

В случае отсутствия ветра (штиль) и при очень слабом ветре  $|\vec{C}| \geq C_{\min}$  мы полагаем, что  $|\vec{C}| = C_{\min}$ , а направление ветра произвольно. Последнее означает, что распределение направлений ветра считается равномерным в круге  $(0, 2\pi)$  и задается в каждый данный момент времени генератором случайных чисел.

Зависимость скорости ветра от вертикальной координаты выбираем в виде:

$$C(z) = C_g \cdot (1 + 0.434 \cdot \ln\{1 + z / z_0\}) , \quad (2.5)$$

где величина  $C_g$  — характеризует скорость ветра у поверхности Земли, параметр  $z_0$  — определяет шероховатость поверхности [20].

#### 2.2.4. Базовая модель метеорологической и климатической системы

В созданной математически-информационной системе реализован следующий принцип. Все входные параметры могут задаваться Пользователем. Если по какой-либо причине они не задаются (например, неизвестны, или требуется исследование при типичных условиях), то используются значения из базовой модели метеорологической и климатической системы [8].

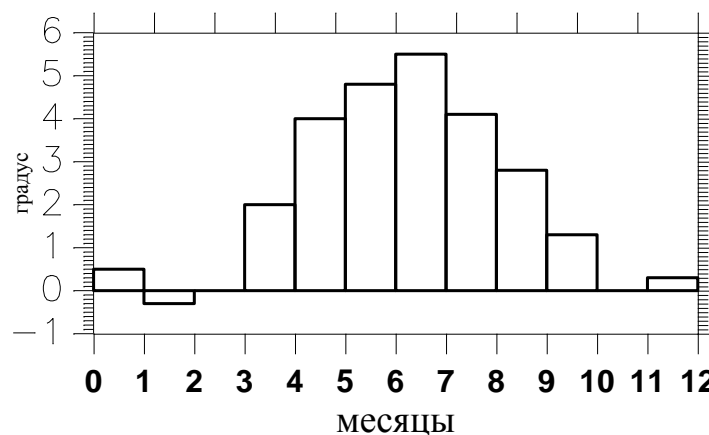


Рис. 2.5 Зависимость величины  $\Delta T_{\text{па}}$  от времени в течение года

В основе лежат прежде всего данные метеорологической станции Волгоград, СХИ и в меньшей степени других [21].

На рис.2.6, 2.7 показаны вероятности появления метеорологических условий, при которых имеются особые условия для самоочистки атмосферы, в течение года

[19]. Наихудшие условия имеем в холодное время года. Дополнительным фактором является уменьшение величины высоты перемешивания  $zH$  в холодное время года за счет уменьшения  $\Delta T_{па}$ . Эффективность вертикального перемешивания примеси определяется в первую очередь вертикальным градиентом температуры. В первом приближении его характеризует разность температур подстилающей поверхности и воздуха  $\Delta T_{па}$ . Эта величина в среднем меняется в течение года (рис.2.5). Причем в феврале она в среднем даже отрицательна.

Гидротермический коэффициент, равный отношению осадков к испаряемости, в среднем составляет 0.35.

Ветровой режим для базовой модели показан на рис.2.8, 2.9.

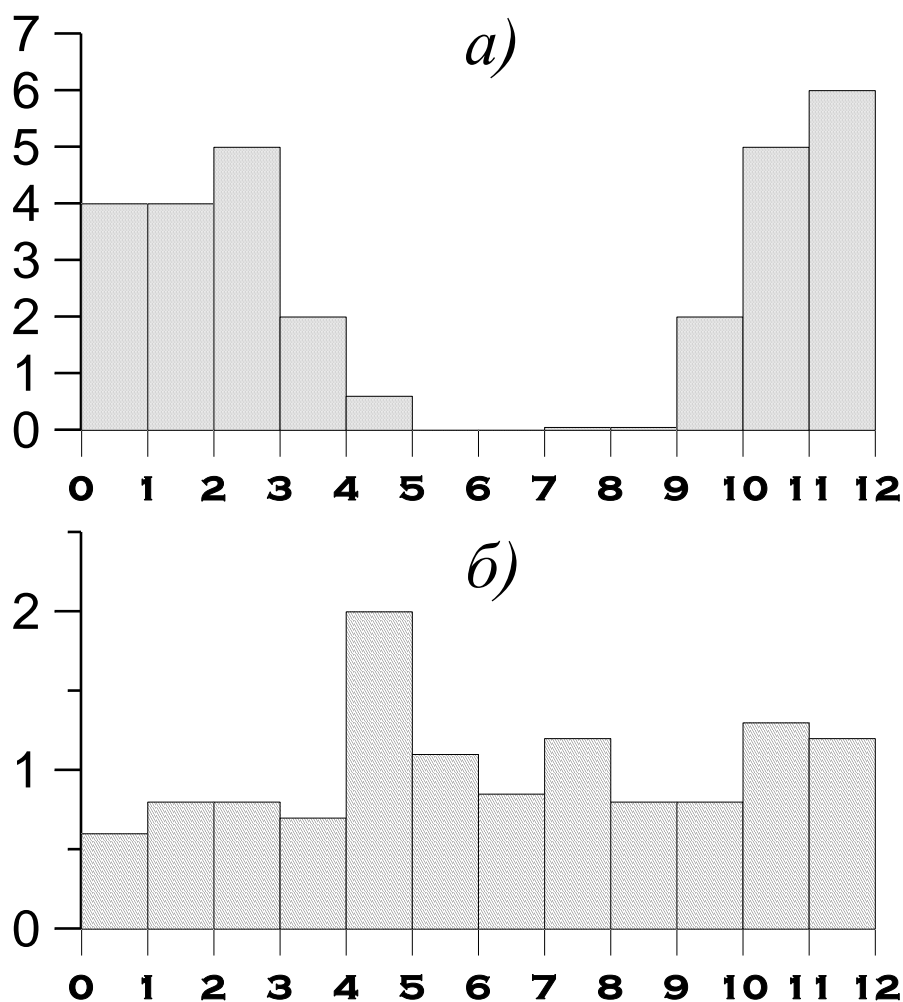


Рис. 2.6 Распределение повторяемости метеорологических параметров (%), неблагоприятных для самоочистки атмосферы, по месяцам (а — число дней с туманами; б — среднее число дней с осадками)



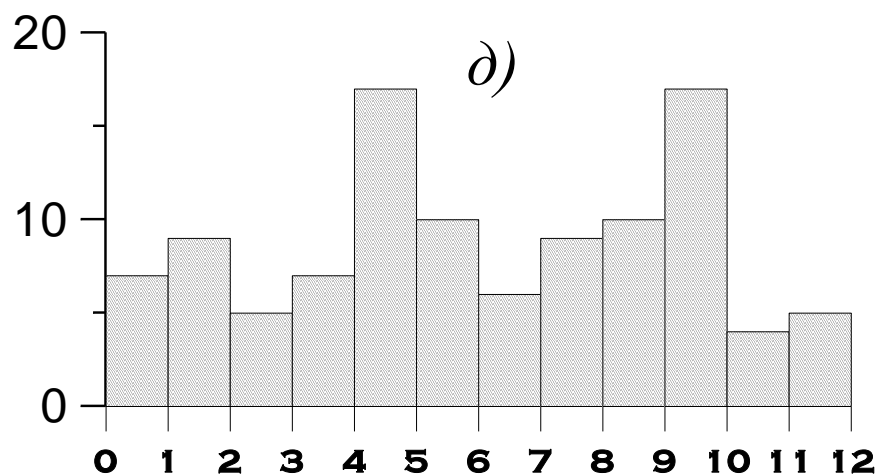
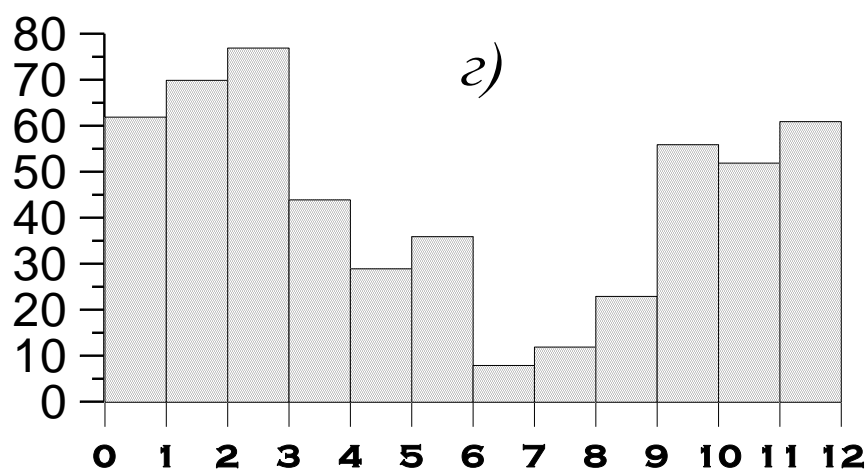
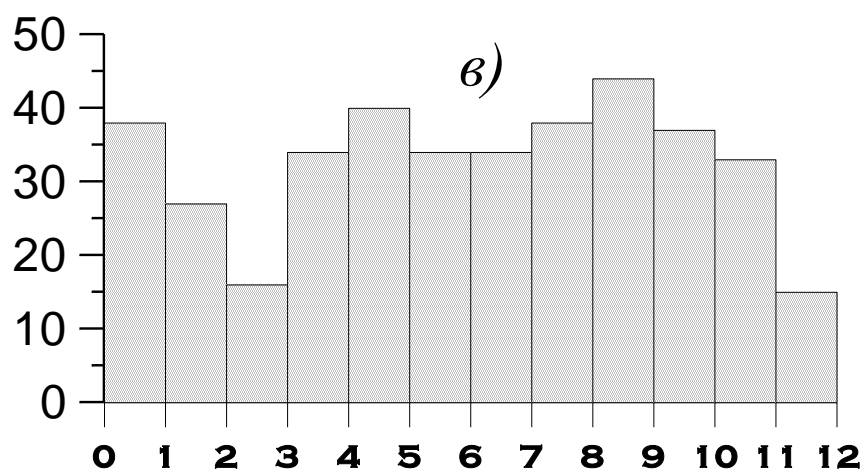


Рис. 2.7. Распределение повторяемости метеорологических параметров (%), неблагоприятных для самоочистки атмосферы, по месяцам (в — повторяемость дней с приземными инверсиями; г — повторяемость дней с высокими инверсиями; д — повторяемость застоев)

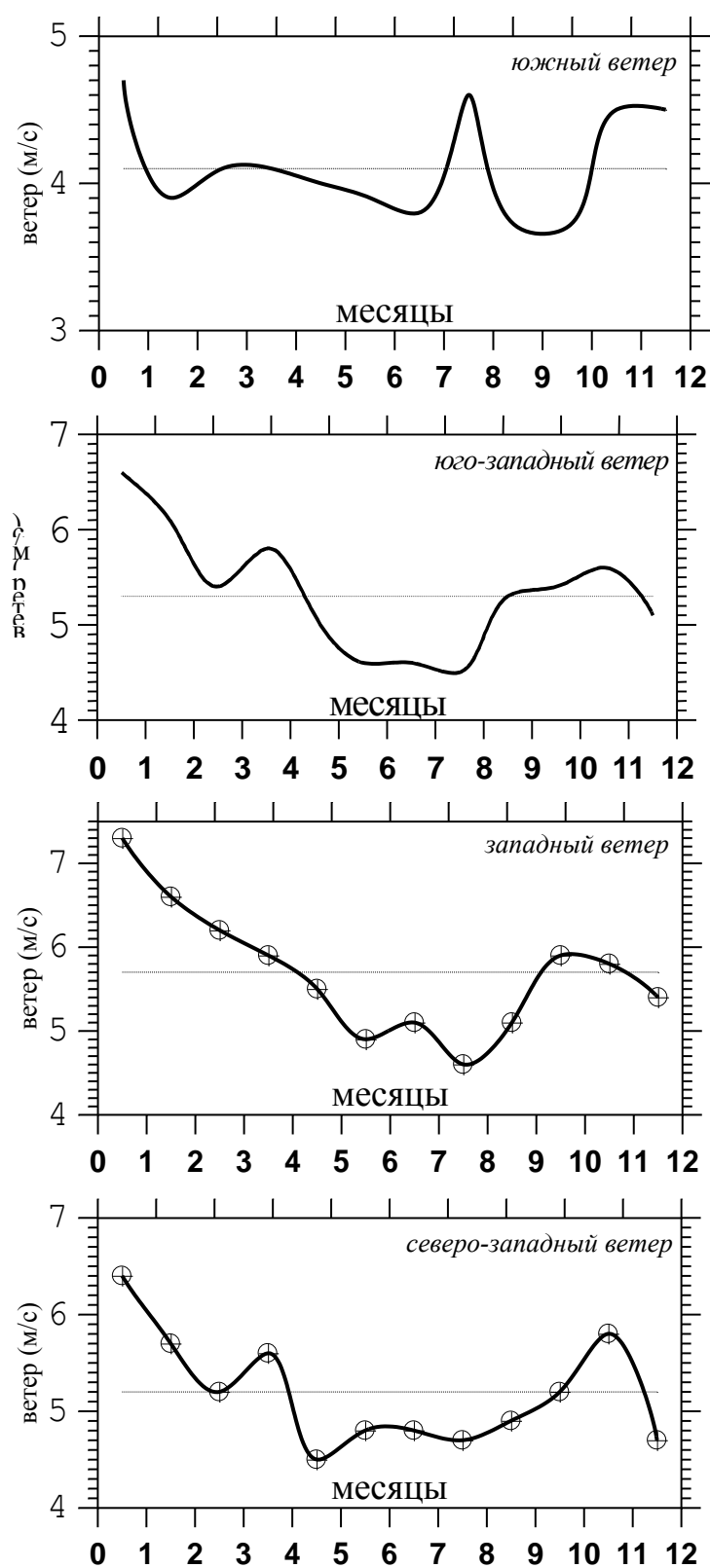


Рис. 2.8. Распределение средней скорости ветра  $C_0$  по различным направлениям (Волгоград, СХИ)

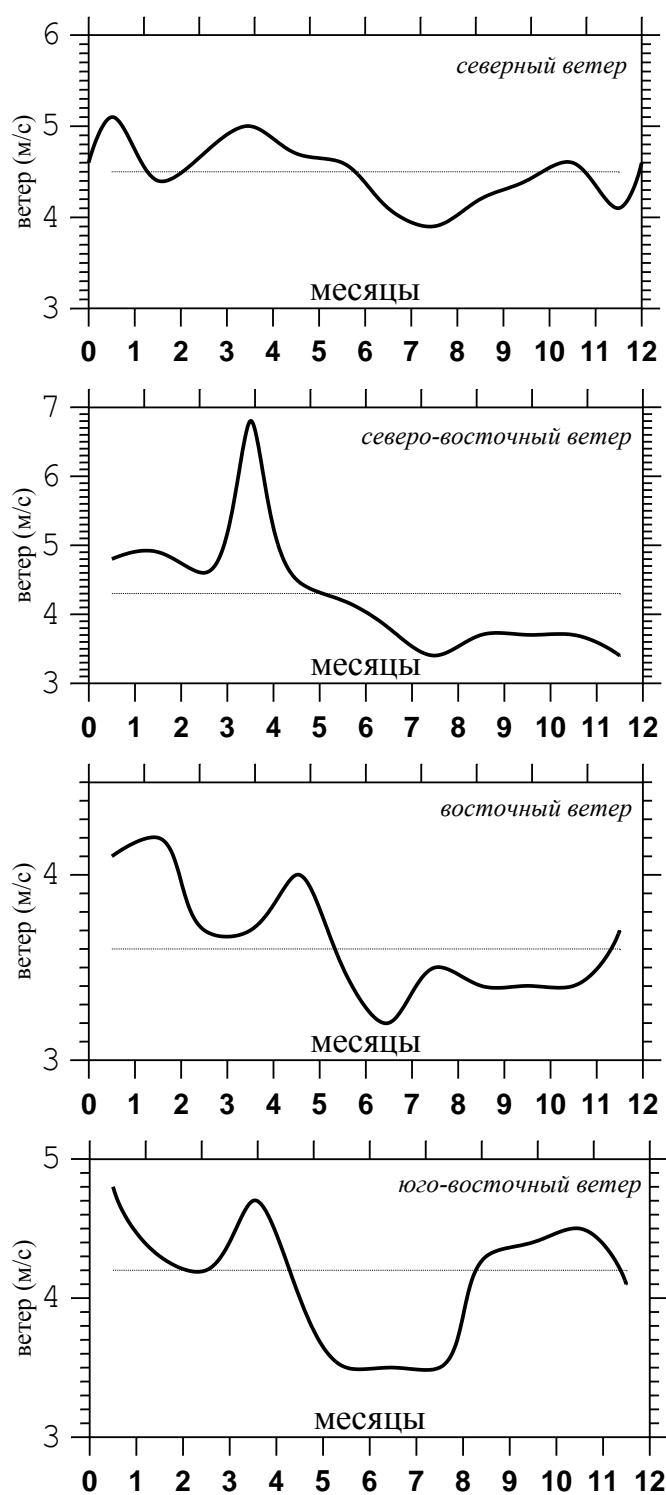


Рис. 2.9. Распределение средней скорости ветра  $C_0$  по различным направлениям (Волгоград, СХИ)

### 2.2.5. Модель источников и стоков

К исходным данным для проведения расчетов по данной методике необходимо знание источников загрязнения — координаты, высота, химический состав и объем выбросов, включая пространственно распределенные источники — пруды-накопители, дороги, карьеры.

Информация по источникам соответствует принятой в общероссийской методике ОНД-86 [1].

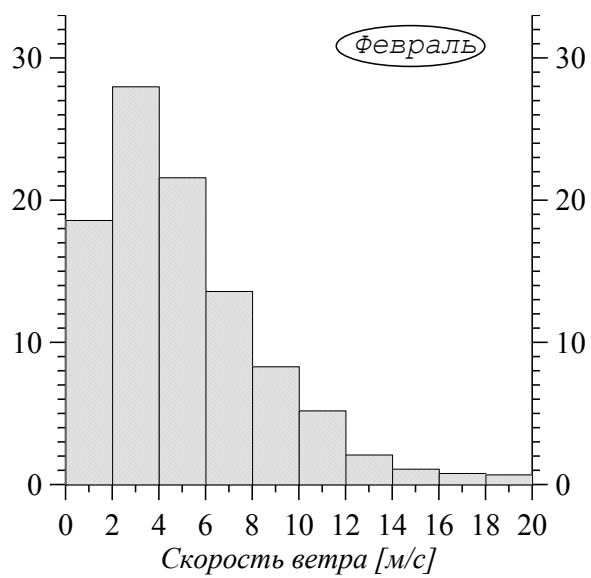
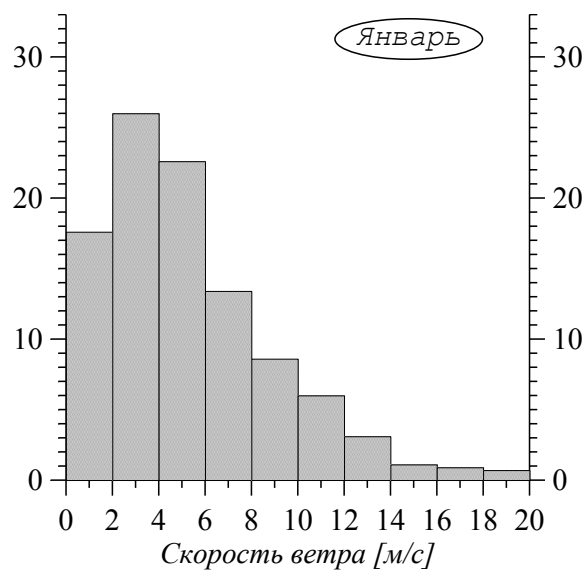
Характер источников может быть произвольный, определяется целями расчета, в частности, различают стационарные и нестационарные, точечные, плоскостные и объемные источники. Основными источниками для модели Светлоярского района являются точечные и плоскостные источники.

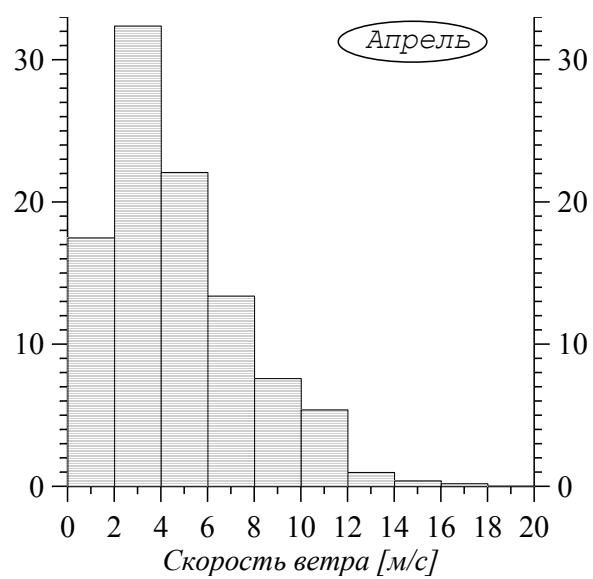
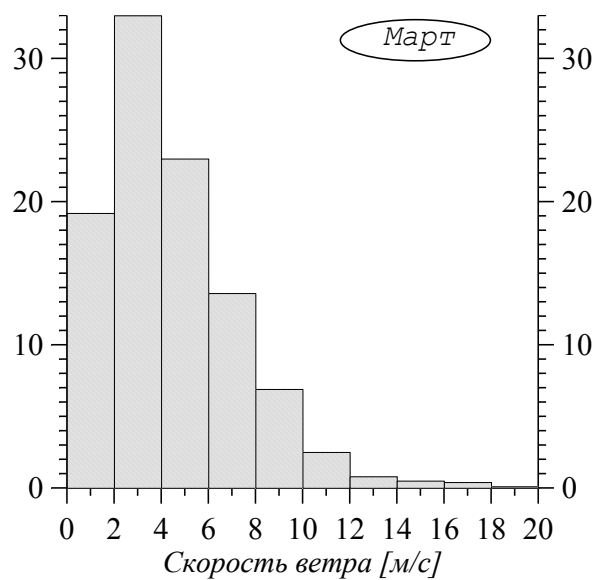
Высота выброса примеси в атмосферу, дальнейшее ее рассеяние и осаждение зависят не только от высоты источника (трубы), но и от таких параметров примеси, как температура и скорость ее вытекания из трубы. Пусть труба имеет высоту  $H_0$ , ее радиус на выходе примеси –  $R_0$ , скорость выноса из жерла трубы –  $\omega_0$ , температура атмосферы –  $T_a$  и температура примеси –  $T_a + \Delta T$ . Тогда эффективная добавка  $\Delta H$  к высоте трубы  $H_0$  ( $H = H_0 + \Delta H$ ) удовлетворительно аппроксимируется соотношением:

$$\Delta H = 3.75 \frac{\omega_0 R_0}{C} + 1.6 \frac{g \Delta T}{T_a C^3} \pi \omega_0 R_0^2. \quad (2.6)$$

Здесь первый член описывает вертикальную инерцию примеси, а второй — ее дополнительную “архимедову” плавучесть.

Выброшенная из трубы примесь попадает в приземный слой на некотором удалении от трубы, величина которого зависит от силы и направления ветра, высоты трубы и толщины пограничного приземного слоя атмосферы, коэффициента диффузии и других параметров задачи. При этом примесь успевает продиффундировать поперек направления ветра.





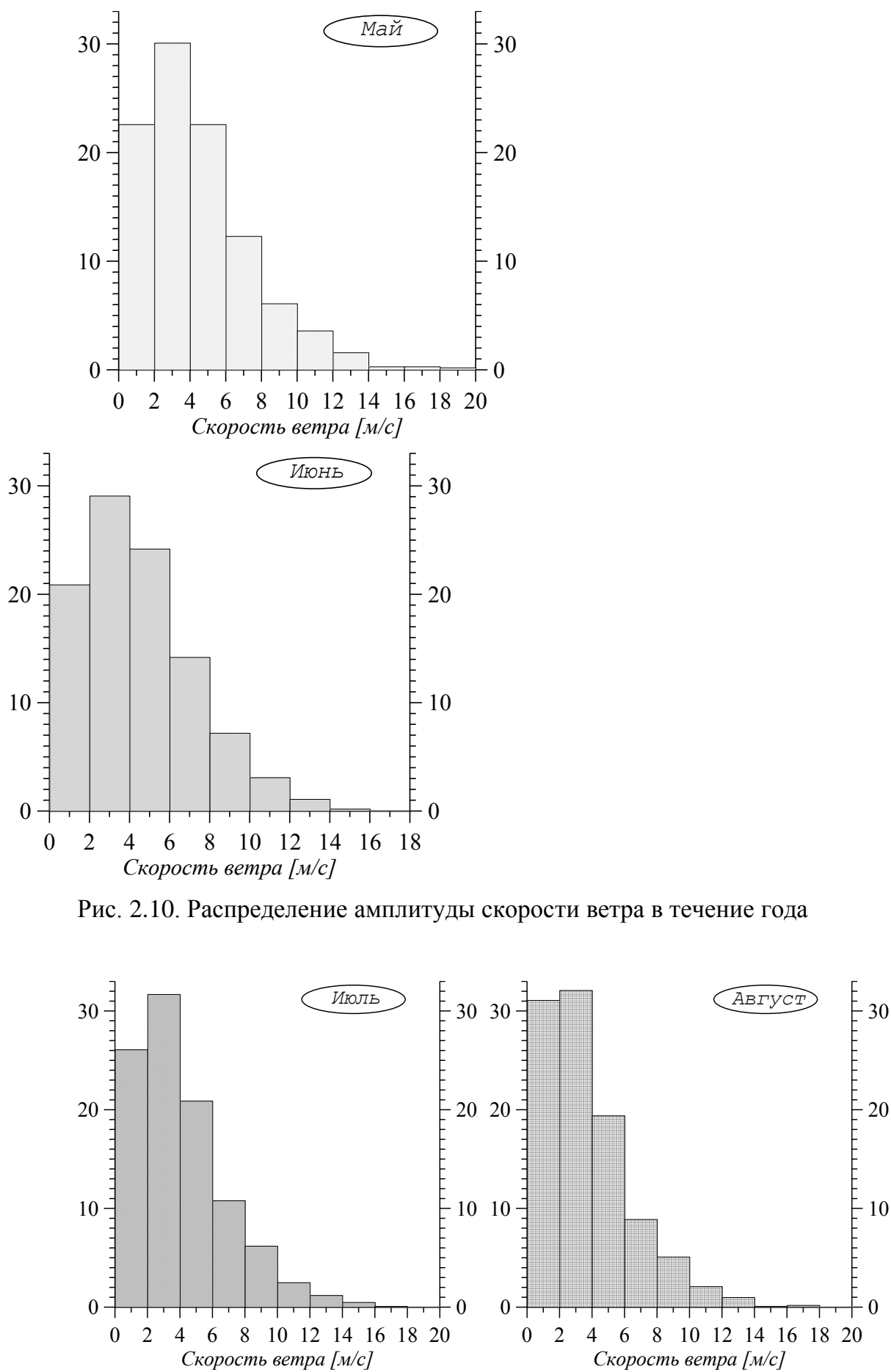


Рис. 2.10. Распределение амплитуды скорости ветра в течение года

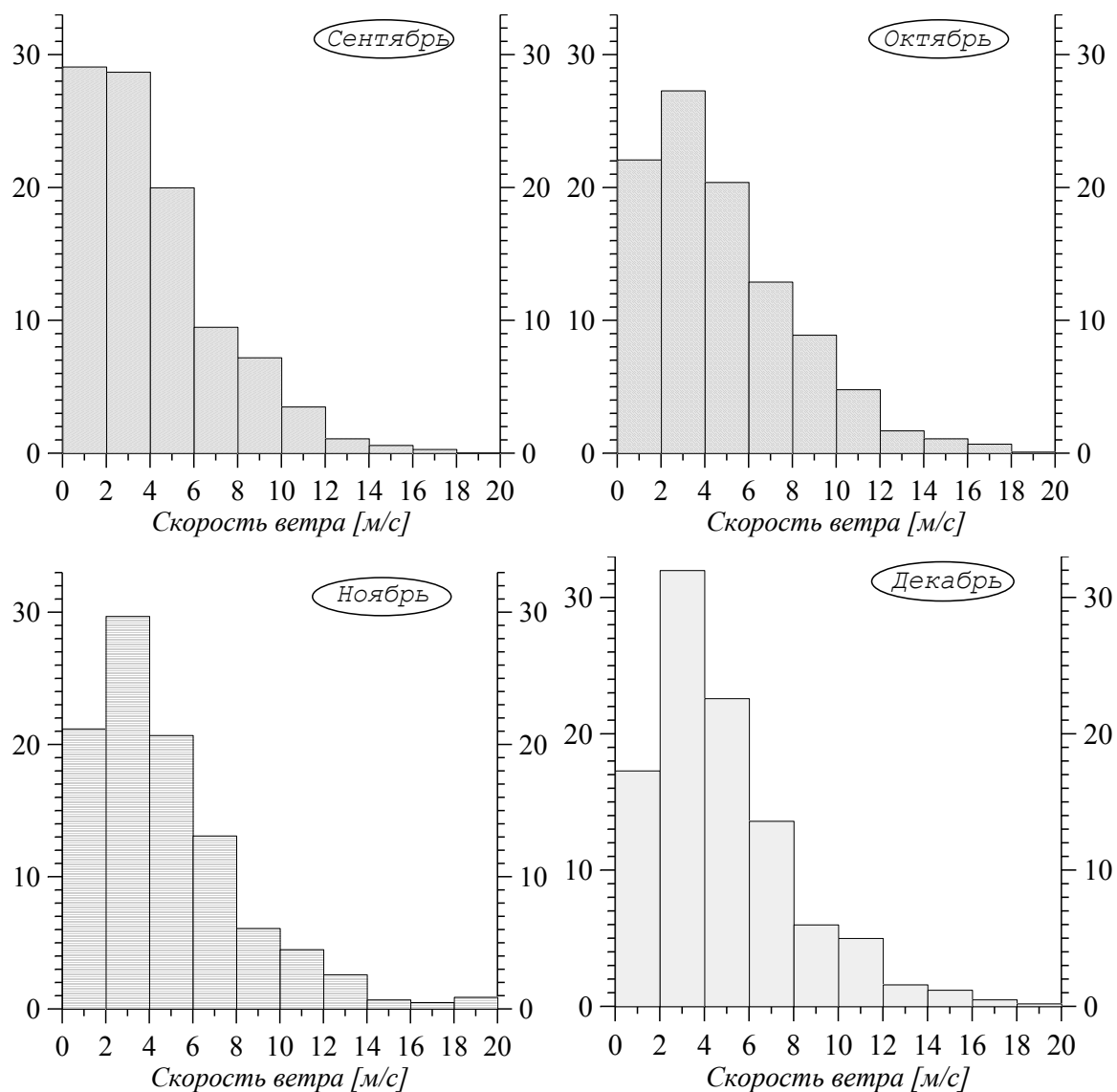


Рис. 2.11 Распределение амплитуды скорости ветра в течение года

Для описания этих эффектов введем в плоскости  $(x, y)$  систему декартовых координат  $(\xi, \eta)$ , начало которой локализовано на источнике примеси, а ось  $\xi$  направлена по ветру. По поперечной к направлению ветра координате  $\eta$  имеет место диффузия, которая за время  $t(\xi) = \xi/C$  превращает начальное “точечное” распределение  $Q = Q_0 \delta(\xi) \delta(\eta)$  ( $\delta$  – дельта-функция Дирака) в нормальное по  $\eta$ :



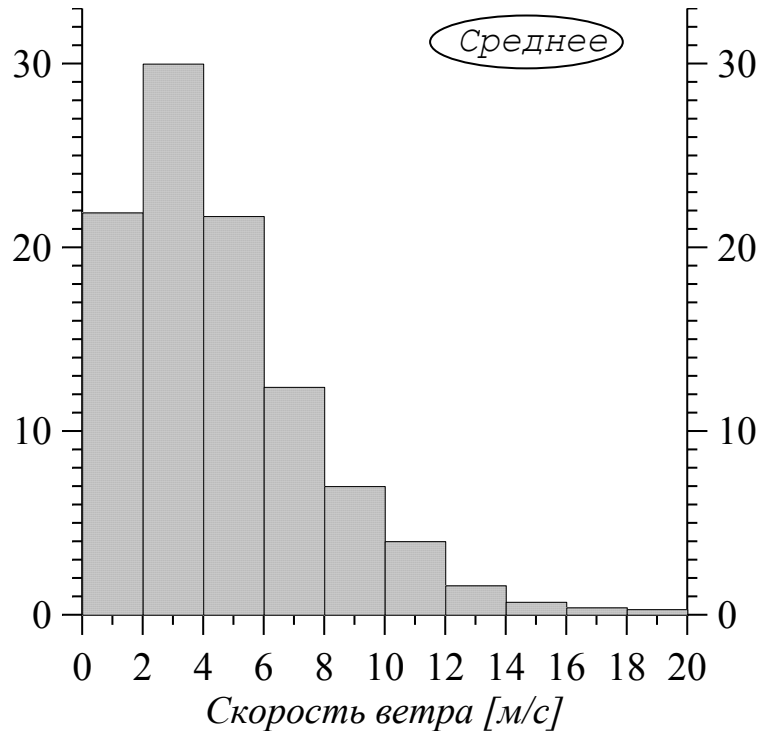


Рис. 2.12. Вероятность появления скорости ветра в среднем за год

$$Q \propto \frac{f(\xi)}{2\sqrt{\pi D \xi / C}} \exp(-\eta^2 C / 4D\xi). \quad (2.7)$$

Такой же процесс диффузии имеется и вдоль направления ветра. Однако из-за неоднородности по высоте ветрового сноса распределение по координате  $\xi$  будет существенно отличаться от нормального. Результаты многочисленных работ на эту тему свидетельствуют, что удовлетворительная точность достигается при следующей аппроксимации:

$$f(\xi) \propto \xi^2 \theta(\xi) \exp(-\xi^2 / \xi_m^2), \quad (2.8)$$

где  $\theta(\xi)$  – функция Хевисайда. Нормировка распределений (2.7) и (2.8) приводит к результату:

$$Q = \frac{2Q_0 \sqrt{C}}{\pi \sqrt{D} \xi_m^3} \xi^{3/2} \exp(-\xi^2 / \xi_m^2 - \eta^2 C / 4D\xi), \quad (2.9)$$

где  $Q_0$  – мощность источника (кг/м<sup>2</sup>сек).

Величину  $\xi_m$  с учетом зависимости  $C$  и  $D$  от вертикальной координаты  $z$  в приземном слое атмосферы ( $C \sim z_{0.2}$ ,  $D \sim z$ ) можно (после усреднения по толщине приземного слоя) представить в виде:

$$\xi_m = \xi_m^{(0)} \cong 0.26 \frac{CL^2}{D} \left( \frac{H}{L} \right)^{1.2}, \quad (2.10)$$

где  $L$  – толщина приземного слоя атмосферы ( $L \sim 50 — 100$  м).

Если рассматриваемая примесь не газообразна и, следовательно, ее частицы не обладают “плавучестью” то следует учесть эффект ускоренного выпадения этой примеси на землю. Вводя для этого стоксову скорость падения отдельной частицы  $w_1$ , имеем:

$$\xi_m = \frac{\xi_m^{(0)}}{1 + 0.28w_1L/D}. \quad (2.11)$$

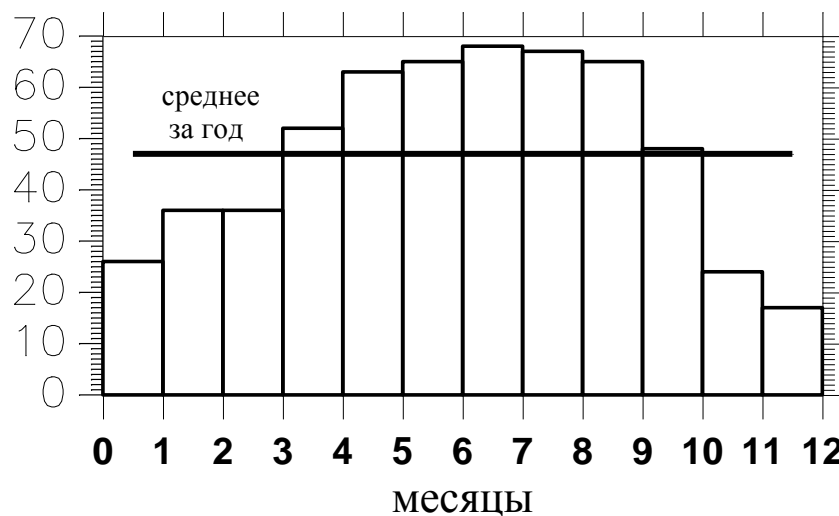


Рис. 2.13. Относительная продолжительность солнечного сияния (%)

Достаточно крупный туман или дождь очищает атмосферу, осаждая примесь на землю. Этот эффект можно учесть модельно с помощью введенного в (2.1) параметра  $\alpha$ . Соответствующий вклад в параметр  $\alpha$  пропорционален кинематической вязкости воздуха  $\nu$  и обратно пропорционален квадрату размера капли тумана  $gm$  ( $\alpha_1 \sim \nu/r^2m$ ).

В зависимости от величины и знака вертикального градиента температуры, исходящая из локализованных и распределенных источников примесь может либо “всплыть” в верхние слои атмосферы (турбулентная конвекция), либо прижиматься к земле и накапливаться в приземном слое толщиной порядка высоты деревьев и зданий. И в первом и во втором случаях соответствующие эффекты можно описать с помощью модельного параметра  $\alpha$  ( $\alpha_2 > 0$ ,  $\alpha_3 > 0$  соответственно). Однако второй из указанных факторов, как наиболее опасный в экологическом отношении, необходимо учесть с помощью локального уравнения “накопления”:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \alpha_3 \rho - \beta q, \quad (2.12)$$

где  $q$  — локальная плотность накапливающейся в приземном слое атмосферы примеси;  $\beta$  - параметр, описывающий полное “вымывание” накопленной примеси.

Как известно, абсолютное значение вертикального градиента температуры и его знак характеризует температурную стратификацию, которая является важным фактором, способствующим увеличению или уменьшению концентрации вредных примесей. Обычно градиентные измерения температуры воздуха измеряются в высотах 0.2 и 1.5 м. Влияние температурной устойчивости атмосферы на турбулентный обмен оценивается по безразмерной величине  $\beta$ , аналогичной по физическому смыслу числу Ричардсона  $Ri$ . Последняя величина характеризует отношение разности температур на выбранных уровнях к скорости ветра

$$\beta = \frac{T(z = 0.2 м) - T(z = 1.5 м)}{C^2(z = 2 м)}.$$

Можно говорить, что атмосфера стратифицировано неустойчива при  $\beta \geq 0.06$ , устойчива при  $\beta \leq 0.05$  и нейтральна при  $\beta \approx 0$ .

#### 2.2.6. Пруды – испарители

Пруды-отстойники могут являться одними из главных источников воздушного загрязнения в Светлоярском районе. В данной модели учитываются 5 объектов (см. § 3.2). Каждый пруд покрывается расчетной сеткой. Каждая ячейка которой моделируется как точечный источник примеси  $W_{ij}^k$ , в результате для  $k$ -го пруда имеем

$$Q^k = \sum_s W_{ij}^k \Delta S_{ij}, \quad (2.13)$$

где суммирование производится по расчетным ячейкам, лежащим в границах водоема. Величины  $W_{ij}^k$  определяют плотность потока примеси с единицы поверхности. В модели принято, что темп поступления вещества в атмосферу пропорционален разности температуры воздуха и водоема  $\Delta T_w$ . Обратное возвращение примеси возможно только при конвективно устойчивой атмосфере (что в условиях пожара не выполняется) и слабом ветре. Поэтому в формуле для приращения массы примеси за время  $\Delta t$

$$\Delta m = K_w (\Delta T_w, C_0) \Delta t, \quad (2.14)$$

коэффициент зависит линейно от скорости ветра.

### 2.2.7. Численная схема

Эволюционное уравнение (2.1) (в котором используются соотношения (2.2) – (2.10)) поддается решению только на ЭВМ.

Вся моделируемая область покрывается сеткой размером  $N \times M \times K$  (для территории 80 км x 80км удовлетворительная точность достигается при  $N, M = 800 \div 800$ ). В вертикальном  $z$  – направлении достаточно ввести несколько слоев ( $K \leq 5$ ), которые учитывают перенос примесей в вертикальном направлении и взаимообмен между приземным слоем атмосферы, верхними слоями и подстилающей поверхностью в соответствии с вышеизложенным.

#### Двумерная многослойная схема.

Выберем плоскую декартову систему координат  $(x, y)$ . Запишем уравнение диффузии (2.1) в виде:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} (u \rho) - \frac{\partial}{\partial y} (v \rho) + \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D \frac{\partial \rho}{\partial y} \right) + Q - \alpha \rho, \quad (2.15)$$

где  $u \equiv C_x$ ,  $v \equiv C_y$  — скорость ветра в  $x$  и  $y$  направлениях соответственно.

Численный алгоритм решения состоит в следующем: вся область интегрирования покрывается фиксированной в пространстве (эйлеровой) расчетной сеткой (рис. 2.14) с прямоугольными ячейками со сторонами в плоской декартовой системе координат  $\Delta x$  и  $\Delta y$ .

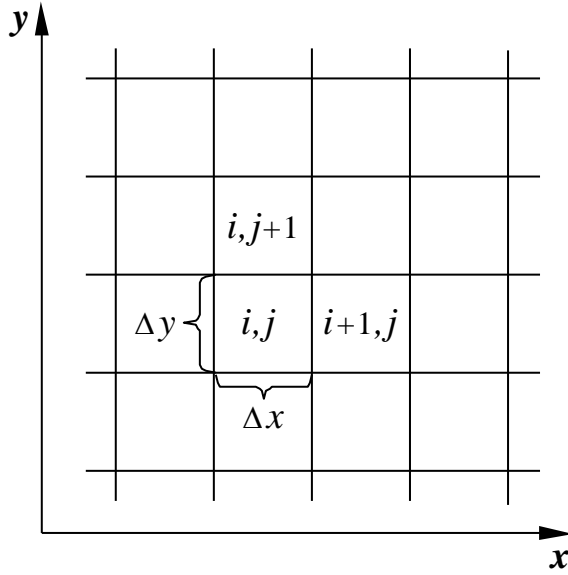


Рис. 2.14. Общая структура расчетной сетки.

Значения целых чисел  $i$  (вдоль  $x$ ) и  $j$  (вдоль  $y$ ) обозначают центр ячейки. В традиционном конечноразностном подходе переменные  $\varphi = (\rho, u, v, Q, D)$  дискретизируются и ассоциируются с узлами пространственной сетки  $x_i, y_j$  и временной сетки  $t_n$ :  $\varphi(x_i, y_j, t_n) \equiv \varphi_{i,j}^n$ . Отметим, что шаг по пространственным координатам постоянен ( $x_{i+1} = x_i + \Delta x$ ,  $y_{j+1} = y_j + \Delta y$ ), а по времени может быть неоднороден ( $t_{n+1} = t_n + \Delta t_n$ ).

Аппроксимируя уравнение (1.7.1) в момент времени  $t_n$  получим следующее явное разностное уравнение относительно  $\rho$  в декартовой системе координат  $(x, y)$  для ячейки  $(i, j)$ :

$$\begin{aligned}
 \rho_{i,j}^{n+1} = & \rho_{i,j}^n - \frac{1}{\Delta x \Delta y} \left( \Delta M_{i+1/2,j}^n - \Delta M_{i-1/2,j}^n + \Delta M_{i,j+1/2}^n - \Delta M_{i,j-1/2}^n \right) + \\
 & + \frac{\Delta t_n}{(\Delta x)^2} \left[ D_{i+1/2,j}^n (\rho_{i+1,j}^n - \rho_{i,j}^n) - D_{i-1/2,j}^n (\rho_{i,j}^n - \rho_{i-1,j}^n) \right] + \\
 & + \frac{\Delta t_n}{(\Delta y)^2} \left[ D_{i,j+1/2}^n (\rho_{i,j+1}^n - \rho_{i,j}^n) - D_{i,j-1/2}^n (\rho_{i,j}^n - \rho_{i,j-1}^n) \right] + \\
 & + \Delta t_n (Q_{i,j}^n - \alpha \rho_{i,j}^n).
 \end{aligned} \tag{2.16}$$

Величины с дробными индексами относятся к границам ячеек и определяются следующим образом:

$$D_{i\pm 1/2,j}^n = D(|\vec{C}|_{i\pm 1/2,j}^n), \quad |\vec{C}|_{i\pm 1/2,j}^n = \frac{|\vec{C}|_{i,j}^n + |\vec{C}|_{i\pm 1,j}^n}{2},$$

$$D_{i,j\pm 1/2}^n = D(|\vec{C}|_{i,j\pm 1/2}^n), \quad |\vec{C}|_{i,j\pm 1/2}^n = \frac{|\vec{C}|_{i,j}^n + |\vec{C}|_{i,j\pm 1}^n}{2},$$

$$\Delta M_{i+1/2,j}^n = \Delta y \Delta t_n \begin{cases} \rho_{i,j}^n u_{i+1/2,j}^n, & \text{если } u_{i+1/2,j}^n > 0 \\ \rho_{i+1,j}^n u_{i+1/2,j}^n, & \text{если } u_{i+1/2,j}^n < 0 \end{cases},$$

$$\Delta M_{i-1/2,j}^n = \Delta y \Delta t_n \begin{cases} \rho_{i,j}^n u_{i-1/2,j}^n, & \text{если } u_{i-1/2,j}^n < 0 \\ \rho_{i-1,j}^n u_{i-1/2,j}^n, & \text{если } u_{i-1/2,j}^n > 0 \end{cases},$$

$$\Delta M_{i,j+1/2}^n = \Delta x \Delta t_n \begin{cases} \rho_{i,j}^n v_{i,j+1/2}^n, & \text{если } v_{i,j+1/2}^n > 0 \\ \rho_{i,j+1}^n v_{i,j+1/2}^n, & \text{если } v_{i,j+1/2}^n < 0 \end{cases},$$

$$\Delta M_{i,j-1/2}^n = \Delta x \Delta t_n \begin{cases} \rho_{i,j}^n v_{i,j-1/2}^n, & \text{если } v_{i,j-1/2}^n < 0 \\ \rho_{i,j-1}^n v_{i,j-1/2}^n, & \text{если } v_{i,j-1/2}^n > 0 \end{cases},$$

где  $u_{i\pm 1/2,j}^n = \frac{u_{i,j}^n + u_{i\pm 1,j}^n}{2}$ ,  $v_{i,j\pm 1/2}^n = \frac{v_{i,j}^n + v_{i,j\pm 1}^n}{2}$ . Посредством  $\Delta M^n$  обозначены

потoki массы через границы эйлеровых ячеек, обусловленные ветровым переносом примеси. При этом полагается, что вся масса переносится только за счет нормальной к границе составляющей скорости.

Как видно из приведенных выше формул для  $\Delta M^n$  характерен учет направления потока на данной границе, что повышает устойчивость вычислений.

Приведенная выше явная схема (2.16) условно устойчива. Иначе говоря, при достаточно больших шагах интегрирования во времени  $\Delta t_n$ , превышающих

характерное время  $t_p \approx \frac{|\Delta \vec{r}|^2}{2D} + \frac{|\Delta \vec{r}|}{|\vec{C}|}$ , за которое возмущение переносится на

расстояние за счет ветра и диффузии, численное решение начинает неограниченно расти, так что спустя конечное число шагов происходит переполнение и остановка расчета. Это явление называется численной неустойчивостью и связано с тем, что в схеме должно учитываться поступление информации в узел  $i, j$  только от соседних узлов  $i \pm 1, j \pm 1$ , в то время как при  $\Delta t_n > t_p$  информация поступает также и от более далеких узлов. Анализ устойчивости схемы (2.16) дает точную границу:

$$\Delta t_n = K \min \left[ \frac{(\Delta x)^2}{2D_{i,j}^n} + \frac{\Delta x}{|u_{i,j}^n|}, \frac{(\Delta y)^2}{2D_{i,j}^n} + \frac{\Delta y}{|v_{i,j}^n|} \right], \quad (2.17)$$

где  $K < 0$  — число Куранта. В численном расчете использовалось значение  $K = 0.5$ .

### Трехмерная схема.

Выберем декартовую систему координат  $(x, y, z)$ . Запишем уравнение диффузии (2.1) в виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} = & - \frac{\partial}{\partial x}(u\rho) - \frac{\partial}{\partial y}(v\rho) - \frac{\partial}{\partial z}(w\rho) + \\ & + \frac{\partial}{\partial x}\left(D \frac{\partial \rho}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(D \frac{\partial \rho}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(K \frac{\partial \rho}{\partial z}\right) + Q - \alpha \rho, \end{aligned} \quad (2.18)$$

где  $u \equiv C_x$ ,  $v \equiv C_y$ ,  $w \equiv C_z$  — скорость ветра в  $x$ ,  $y$  и  $z$  направлениях соответственно,  $K$  — коэффициент турбулентной диффузии в вертикальном направлении (в общем случае  $K \neq D$ ).

Как и для двумерной схемы вся область интегрирования покрывается фиксированной в пространстве (эйлеровой) расчетной сеткой с прямоугольными ячейками со сторонами в декартовой системе координат  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  и  $\Delta z$ . Значения целых чисел  $i$  (вдоль  $x$ ),  $j$  (вдоль  $y$ ) и  $k$  (вдоль  $z$ ) обозначают центр ячейки. Переменные  $\varphi = (\rho, u, v, w, Q, D, K)$  дискретизируются и ассоциируются с узлами пространственной сетки  $x_i, y_j, z_k$  и временной сетки  $t_n$ :  $\varphi(x_i, y_j, z_k, t_n) \equiv \varphi_{i,j,k}^n$ . Шаг по пространственным координатам постоянен ( $x_{i+1} = x_i + \Delta x$ ,  $y_{j+1} = y_j + \Delta y$ ,  $z_{k+1} = z_k + \Delta z$ ), а по времени может быть неоднороден ( $t_{n+1} = t_n + \Delta t_n$ ). Аппроксимируя уравнение (2.18) в момент времени  $t_n$  получим следующее явное разностное уравнение относительно  $\rho$  в декартовой системе координат  $(x, y, z)$  для ячейки  $(i, j, k)$ :

$$\begin{aligned} \rho_{i,j,k}^{n+1} = & \rho_{i,j,k}^n - \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} \left( \Delta M_{i,j+1/2,k}^n - \Delta M_{i,j-1/2,k}^n + \right. \\ & \left. + \Delta M_{i,j+1/2,k}^n - \Delta M_{i,j-1/2,k}^n + \Delta M_{i,j,k+1/2}^n - \Delta M_{i,j,k-1/2}^n \right) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\Delta t_n}{(\Delta x)^2} \left[ D_{i+1/2,j,k}^n (\rho_{i+1,j,k}^n - \rho_{i,j,k}^n) - D_{i-1/2,j,k}^n (\rho_{i,j,k}^n - \rho_{i-1,j,k}^n) \right] + \\
& + \frac{\Delta t_n}{(\Delta y)^2} \left[ D_{i,j+1/2,k}^n (\rho_{i,j+1,k}^n - \rho_{i,j,k}^n) - D_{i,j-1/2,k}^n (\rho_{i,j,k}^n - \rho_{i,j-1,k}^n) \right] + \\
& + \frac{\Delta t_n}{(\Delta z)^2} \left[ K_{i,j+1/2,k}^n (\rho_{i,j+1,k}^n - \rho_{i,j,k}^n) - K_{i,j-1/2,k}^n (\rho_{i,j,k}^n - \rho_{i,j-1,k}^n) \right] + \\
& + \Delta t_n (\mathcal{Q}_{i,j}^n - \alpha \rho_{i,j}^n).
\end{aligned} \tag{2.19}$$

Величины с дробными индексами относятся к границам ячеек и определяются следующим образом:

$$D_{i\pm 1/2,j,k}^n = D(|\vec{C}|_{i\pm 1/2,j,k}^n), \quad |\vec{C}|_{i\pm 1/2,j,k}^n = \frac{|\vec{C}|_{i,j,k}^n + |\vec{C}|_{i\pm 1,j,k}^n}{2},$$

$$D_{i,j\pm 1/2,k}^n = D(|\vec{C}|_{i,j\pm 1/2,k}^n), \quad |\vec{C}|_{i,j\pm 1/2,k}^n = \frac{|\vec{C}|_{i,j,k}^n + |\vec{C}|_{i,j\pm 1,k}^n}{2},$$

$$\Delta M_{i+1/2,j,k}^n = \Delta y \Delta z \Delta t_n \begin{cases} \rho_{i,j,k}^n u_{i+1/2,j,k}^n, & \text{если } u_{i+1/2,j,k}^n > 0 \\ \rho_{i+1,j,k}^n u_{i+1/2,j,k}^n, & \text{если } u_{i+1/2,j,k}^n < 0 \end{cases},$$

$$\Delta M_{i-1/2,j,k}^n = \Delta y \Delta z \Delta t_n \begin{cases} \rho_{i,j,k}^n u_{i-1/2,j,k}^n, & \text{если } u_{i-1/2,j,k}^n < 0 \\ \rho_{i-1,j,k}^n u_{i-1/2,j,k}^n, & \text{если } u_{i-1/2,j,k}^n > 0 \end{cases},$$

$$\Delta M_{i,j+1/2,k}^n = \Delta x \Delta z \Delta t_n \begin{cases} \rho_{i,j,k}^n v_{i,j+1/2,k}^n, & \text{если } v_{i,j+1/2,k}^n > 0 \\ \rho_{i,j+1,k}^n v_{i,j+1/2,k}^n, & \text{если } v_{i,j+1/2,k}^n < 0 \end{cases},$$

$$\Delta M_{i,j-1/2,k}^n = \Delta x \Delta z \Delta t_n \begin{cases} \rho_{i,j,k}^n v_{i,j-1/2,k}^n, & \text{если } v_{i,j-1/2,k}^n < 0 \\ \rho_{i,j-1,k}^n v_{i,j-1/2,k}^n, & \text{если } v_{i,j-1/2,k}^n > 0 \end{cases},$$

$$\Delta M_{i,j,k+1/2}^n = \Delta x \Delta y \Delta t_n \begin{cases} \rho_{i,j,k}^n w_{i,j,k+1/2}^n, & \text{если } w_{i,j,k+1/2}^n > 0 \\ \rho_{i,j,k+1}^n w_{i,j,k+1/2}^n, & \text{если } w_{i,j,k+1/2}^n < 0 \end{cases},$$

$$\Delta M_{i,j,k-1/2}^n = \Delta x \Delta y \Delta t_n \begin{cases} \rho_{i,j,k}^n w_{i,j,k-1/2}^n, & \text{если } w_{i,j,k-1/2}^n < 0 \\ \rho_{i,j,k-1}^n w_{i,j,k-1/2}^n, & \text{если } w_{i,j,k-1/2}^n > 0 \end{cases},$$



$$\text{где} \quad u_{i\pm 1/2,j,k}^n = \frac{u_{i,j,k}^n + u_{i\pm 1,j,k}^n}{2}, \quad v_{i,j\pm 1/2,k}^n = \frac{v_{i,j,k}^n + v_{i,j\pm 1,k}^n}{2},$$

$$w_{i,j,k\pm 1/2}^n = \frac{w_{i,j,k}^n + w_{i,j,k\pm 1}^n}{2}. \quad \text{Посредством } \Delta M^n \text{ обозначены потоки массы через}$$

границы эйлеровых ячеек, обусловленные ветровым переносом примеси.

Приведенная выше явная схема (2.19) также как и схема (2.16) условно устойчива. Анализ устойчивости схемы (2.19) дает точную границу:

$$\Delta t_n = K \min \left[ \frac{(\Delta x)^2}{2D_{i,j,k}^n} + \frac{\Delta x}{|u_{i,j,k}^n|}, \frac{(\Delta y)^2}{2D_{i,j,k}^n} + \frac{\Delta y}{|v_{i,j,k}^n|}, \frac{(\Delta z)^2}{2K_{i,j,k}^n} + \frac{\Delta z}{|w_{i,j,k}^n|} \right], \quad (2.20)$$

где  $K < 0$  — число Куранта. В численном расчете использовалось значение  $K = 0.5$ .

### 2.2.8. Граничные условия

Уравнение (2.15) имеет бесконечное множество решений. Для выделения конкретного решения необходимо задание дополнительных условий гарантирующих единственность решения. Эти условия определяются физической постановкой задачи и могут быть разбиты на две группы:

Краевые (граничные) условия.

Начальные условия.

Краевые условия определяются способом диффузионного обмена на границе рассматриваемой области и бывают четырех видов:

1. Краевые условия 1-го рода — заключаются в задании концентрации на границе области. Заменяет действие источников вне расчетной области

$$\rho(t, \vec{r})|_S = \varphi(t). \quad (2.21)$$

2. Краевые условия 2-го рода — заключаются в задании диффузионного потока на границе области.

$$\left. \frac{\partial \rho(t, \vec{r})}{\partial \vec{n}} \right|_S = \varphi(t), \quad (2.22)$$

где  $\vec{n}$  — единичный вектор нормали к поверхности.

3. Краевые условия 3-го рода — заключаются в задании линейной комбинации функции  $\rho$  и её нормальной производной  $\partial \rho / \partial \vec{n}$  на границе области.

$$\alpha \rho(t, \vec{r})|_S + \beta \frac{\partial \rho(t, \vec{r})}{\partial \vec{n}} \Big|_S = \varphi(t), \quad (2.23)$$

где  $\alpha, \beta$  – произвольные постоянные.

4. Краевые условия 4-го рода — заключаются в задании на одной части границе условий 1-го рода, а на другой условий 2-го рода.

Начальные условия заключаются в задании концентрации примеси в расчетной области в момент времени  $t = 0$ . С физической точки зрения начальные условия учитывают действие источников действовавших до момента времени  $t = 0$ .

Граничные условия (2.21) – (2.23) необходимо представить в конечноразностном виде. Чтобы не нарушать единообразие вычислений и не применять особые формулы для граничных ячеек, вдоль всех границ вводятся слои фиктивных ячеек, куда и засылаются соответствующие параметры из смежных ячеек расчетной области. Число таких слоев определяется порядком разностной схемы (для первого порядка — один слой и т. п.). В нашем случае, поскольку разностная схема (2.16) первого порядка имеем один слой фиктивных ячеек (см. рис. 2.15).

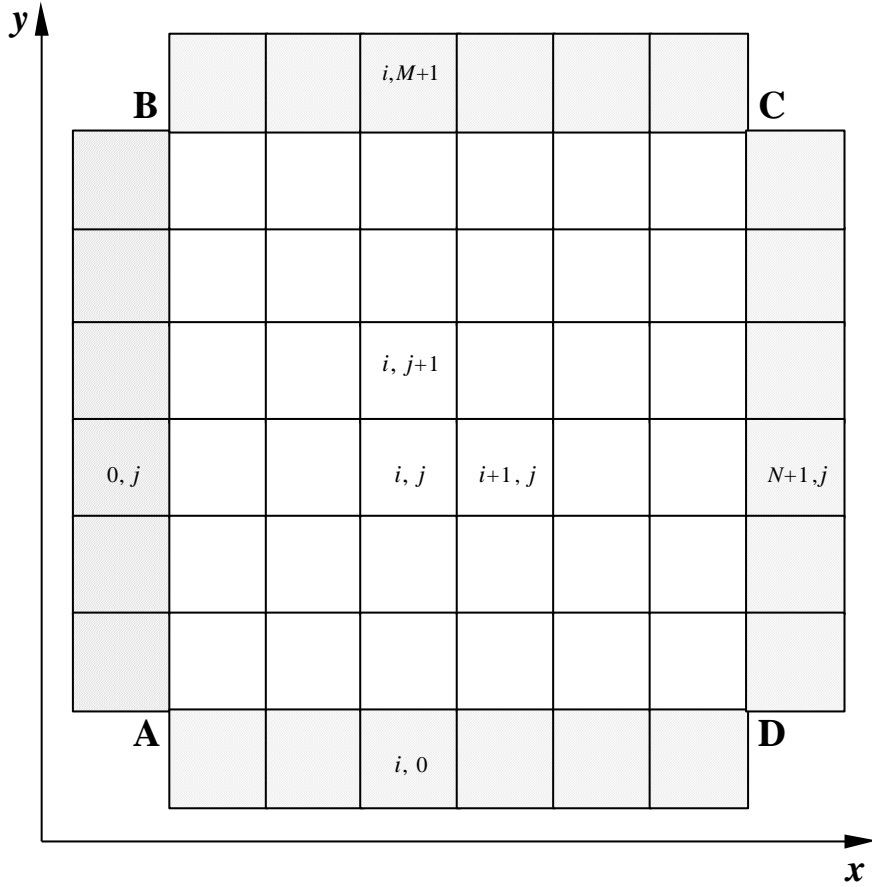


Рис. 2.15. Структура расчетной сетки для рассматриваемой задачи (слои фиктивных ячеек заштрихованы).

Для расчетной области представленной на рис. 2.15 краевое условие (2.2.1) можно представить в виде:

$$\begin{aligned} AB: \rho_{0,j}^{n+1} &= \varphi^{n+1}, & CD: \rho_{N+1,j}^{n+1} &= \varphi^{n+1}, \\ AD: \rho_{i,0}^{n+1} &= \varphi^{n+1}, & BC: \rho_{i,M+1}^{n+1} &= \varphi^{n+1}. \end{aligned} \quad (2.2.4)$$

Краевое условие (2.16) представимо в виде:

$$\begin{aligned} AB: \rho_{0,j}^{n+1} &= \rho_{1,j}^{n+1} - \varphi^{n+1} dx, & CD: \rho_{N+1,j}^{n+1} &= \varphi^{n+1} dx - \rho_{N,j}^{n+1}, \\ AD: \rho_{i,0}^{n+1} &= \rho_{i,1}^{n+1} - \varphi^{n+1} dy, & BC: \rho_{i,M+1}^{n+1} &= \varphi^{n+1} dy - \rho_{i,M}^{n+1}. \end{aligned} \quad (2.2.5) \quad 1.8.5)$$

Аналогично могут быть представлены в конечноразностном виде краевые условия 3-го и 4-го рода.

В процессе выполнения работы проводилось тестирование с граничными условиями (2.2.4) и (2.2.5). При этом полагалось, что функция  $\varphi(t) = 0$ .

На рис. 2.16 показаны тестовые результаты расчетов с использованием описанных выше граничных условий.

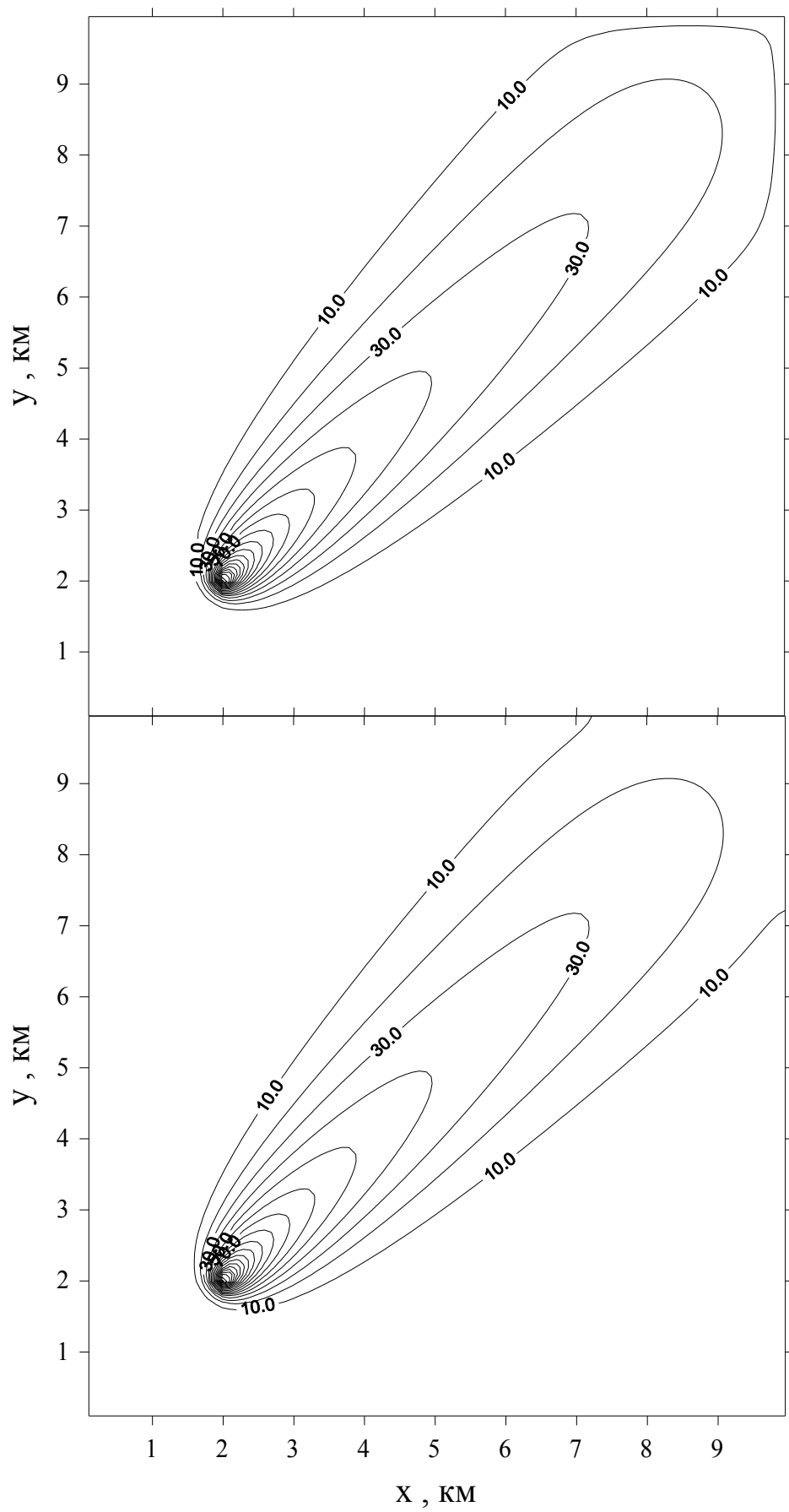


Рис.2.16. Распределение примеси в моделях с разными граничными условиями

Как видно из рисунков заметные различия в распределении плотности примесей имеются только в приграничной области. В результате можно сделать вывод, что выбор граничных условий практически не сказывается на распределении примесей, если область моделирования превышает  $100 \text{ км}^2$ , что выполняется с хорошим запасом в наших расчетах.

Отметим, что при использовании граничных условий второго типа отсутствует диффузионный поток вещества через границы расчетной области. Это может приводить к накоплению примесей в области расчета в отсутствие ветрового переноса. Поэтому более корректными являются граничные условия первого типа.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Методика расчета концентраций в атмосферном воздухе вредных веществ, содержащихся в выбросах предприятий. ОНД-86. Ленинград: Гидрометеиздат, 1987.
2. Берлянд М.Е. Прогноз и регулирование загрязнения атмосферы. Ленинград: Гидрометеиздат, 1985.
3. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982.
4. Экологический программный комплекс для персональных ЭВМ. Под ред. А.С. Гаврилова. СПб.: Гидрометеиздат, 1992.
5. Морозов А.Г., Леви В.В., Ойberman И.И. Моделирование распространения примеси в воздушном бассейне промышленного района. // Математическое моделирование в задачах механики и управления. Волгоград, 1990.
6. Елепов Б.С., Кронберг А.А., Михайлов Г.А., Сабельфельд К.К. Решение краевых задач методом Монте-Карло. Новосибирск: Наука, 1980.
7. Коваленко И.Г., Макаров А.В., Морозов А.Г., Чегулов А.В. Статистическое моделирование переноса примеси в атмосфере методом лагранжевых блуждающих частиц. // Рациональное использование природных ресурсов и охрана окружающей среды. Вып. 14, Ленинград, 1991.
8. Смирнов Е.Д., Хоперсков А.В., Информационно-математическая модель Волгоградского водохранилища с учетом статистического ансамбля реализаций погодных условий. Том 4. Вып. 1. Специальный выпуск журнала "Известия высших учебных заведений. Радиофизика". Под. ред. И.С. Емельяновой. – Н.Новгород: НИРФИ, 1997. С.155-162.
9. Берлянд М.Е. Современные проблемы атмосферной диффузии и загрязнения атмосферы. Л.: Гидрометеиздат, 1975.
10. Липанов А.М., Кисаров Ю.Ф., Ключников И.Г. Математическое моделирование турбулентных потоков. Математическое моделирование, т.9, №2, 1997, 113-116.
11. Теоретическая экология. Под ред. В.В. Алексеева, В.Д. Федорова. М.: Изд-во МГУ, 1987.
12. Халтугин Е.И., Жалковский Е.А., Жданов Н.Д. Цифровые карты. М.: Недра, 1992, 419 с.
13. Крукиер Л.А. Математическое моделирование процессов переноса в несжимаемых средах с преобладающей конвекцией. – Математическое моделирование, т.9, №2, 1997. С.4–12.

14. Сипливый Б.Н. и др. Разработка научного обоснования и методики экологического мониторинга Волгоградской области. Волгоград, 1999.
15. Словарь терминов, относящихся к Системе отображения электронной карты информации, версия 1.1, специальная публикация 52, приложение 3, МГБ, Монако, 1992.
16. Павлидис Т. Алгоритмы машинной графики и обработка изображений. М.: Мир, 1986.
17. Хоперсков А.В. Математическое моделирование экосистем // Социальная экология. Волгоград: Изд-во ВолГУ, 1993, 88-91.
18. Хоперсков А.В. Экологический мониторинг приземного слоя атмосферы // “Высшая школа в решении экологических проблем Н.-Волжского региона”, Волгоград, 1994, 24–25.
19. Коваленко И.Г., Леви В.В., Морозов А.Г., Хоперсков А.В. Оценка интегрального загрязнения приземного слоя атмосферы. // Межрегиональная научно-практическая конференция “Проблемы экологического страхования”, Волжский, 1995, 31 – 33.
20. Хргиан А.Х. Физика атмосферы. М.: Изд-во ф.-м. лит-ры, 1958.
21. Климат Волгограда. Л.: Гидрометеиздат, 1989.
22. Охрана атмосферы и предельно допустимые выбросы загрязняющих веществ по г. Волгограду. Волгоград, 1986.
23. Временная методика нормирования промышленных выбросов в атмосферу (расчет и порядок разработки нормативов предельно допустимых выбросов). М.: Госомгидромет, 1981.
24. Першин С.Е. К вопросу о медико-экологических параллелях здоровья населения Волгограда. ПЭВ, №4, Волгоград, 1997, 112
25. Филатов Б.Н., Колодий Т.И., Вишневецкая Л.П., Авалиани С.Л. Канцерогенный риск для здоровья населения от выбросов в атмосферу промышленных предприятий г. Волгограда, ПЭВ №5, Волгоград, 1998, 354
26. Квартовкина Л.К. и др. Смертность как один из показателей экологического неблагополучия Волгоградской области. ПЭВ, №3, Волгоград, 1996, 72
27. Манаенков И.В., Лобачева Г.К., Кирпо Н.И. О влиянии атмосферных выбросов промышленных предприятий на структуру почвенного покрова. ПЭВ, №4, Волгоград, 1997, 177