УДК 510.67:554

К МОДЕЛИРОВАНИЮ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПРИМЕСИ ОТ ДИНАМИЧЕСКОГО ПЛОЩАДНОГО ИСТОЧНИКА[1]

***Цыбульников А. А.*[2], *Павлова А. В.*[3]**

TO THE PROBLEM OF MODELING OF POLLUTANT PROPAGATION FROM A DYNAMIC AREA SOURCE

Tsybulnikov A. A., Pavlova A. V.

The work considers the model of pollutant propagation in the atmosphere from the source changing the area and intensity as a result of diffusion processes. The suggested approach combines different methods of solving the problem of pollutants migration. Application of analytic representations of an integral characteristic of the pollutant concentration on the source level makes it possible to facilitate the calculating process of the dynamic problem solution. Its discreet approximations and calculating scheme are based on the splitting method.

Одним из основных подходов к изучению миграции загрязняющих веществ (ЗВ) в атмосфере является использование математических моделей, основанных на уравнении переноса с учетом диффузии, гравитационного оседания, и трансформации примеси при взаимодействии ее составляющих между собой или атмосферой [1, 2]. В рамках этой модели рассмотрен процесс распространения загрязняющего вещества от источника, также изменяющего площадь и интенсивность в результате диффузионных процессов.

1. В дифференциальной формулировке модель миграции загрязняющей примеси в атмосфере можно представить следующим образом

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} + \operatorname{div}(\varphi_i \mathbf{a}) + (B\varphi)_i = \\ = \sum_{k=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_k}\left(K_k \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_k}\right) + q_i(\mathbf{x}, t), \quad (1)$$

где $\varphi(\mathbf{x}, t) = (\varphi_1, \varphi_2, \ldots, \varphi_n)$ — вектор концентраций компонент примеси, $\mathbf{a} = (u, v, w - w_{gi})$, u, v, w — компоненты вектора скорости воздушных масс, w_{gi} — величина скорости гравитационного оседания i-й компоненты примеси (для легких примесей $w_g = 0$), K_k, $k = \overline{1,3}$ — коэффициенты диффузии в направлении соответствующих осей, $B\varphi$ — оператор трансформации компонентов примеси. Функции q_i описывают распределение и мощность источника i-й компоненты примеси.

Уравнение решается в области

$$D_t = \{D \times [0, T]\},$$

где

$$D = \{-X < x_1 < X, -Y < x_2 < Y, 0 < x_3 < H\},$$

при заданном начальном распределении примеси

$$\varphi_i|_{t=0} = \varphi_{0i}.$$

На боковых поверхностях параллелепипеда могут быть заданы условия непроницаемости либо выхода на фоновые значения концентрации загрязнителя.

Далее подстилающая поверхность считается однотипной, хотя в общем случае может быть разбита на M разнотипных по свойствам зон Ω_m, $m = \overline{1, M}$.

[1]Работа выполнена при поддержке РФФИ_р_юг (06-01-96635, 06-01-96643), гранта Президента РФ (НШ-2298-2008.1).

[2]Цыбульников Антон Андреевич, аспирант кафедры математического моделирования Кубанского государственного университета.

[3]Павлова Алла Владимировна, канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры математического моделирования Кубанского государственного университета; e-mail: pavlova@fpm.kubsu.ru.

Предполагая, что примесь взаимодействует с поверхностью земли, имеем следующее граничное условие на нижней границе [2]

$$K_3 \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_3} - \beta_i \varphi_i \Big|_{x_3=0} = g_{0i}, \qquad (2)$$

β_i — величины, характеризующие взаимодействие составляющих примеси с подстилающей поверхностью, функция g_{0i} описывает поверхностный источник примеси. В частности, если известна концентрация загрязнителя на уровне источника, граничное условие (2) принимает вид

$$\varphi_i\left(x_1, x_2, 0, t\right) = f_{0i}\left(x_1, x_2, t\right). \qquad (3)$$

При решении задачи для вертикальных профилей компонент вектора скорости ветра $u\left(x_3\right)$, $v\left(x_3\right)$, пренебрегая зависимостью параметра Кориолиса и плотности от горизонтальных координат, можно воспользоваться соотношениями

$$u\left(x_3\right) = U_g\left(1 - e^{-ax_3}\cos ax_3\right) - V_g e^{-ax_3}\sin ax_3,$$

$$v\left(x_3\right) = V_g\left(1 - e^{-ax_3}\cos ax_3\right) + U_g e^{-ax_3}\sin ax_3,$$

$a = \sqrt{\frac{l}{2k}}$, k — коэффициент турбулентной вязкости, l — параметр Кориолиса, U_g, V_g — скорости геострофического ветра.

Вертикальная составляющая скорости ветра $w\left(x_3\right)$ из уравнения неразрывности

$$\int\limits_0^{x_3} w\left(\xi\right) d\xi = -\int\limits_0^{x_3}\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}\right) d\xi.$$

Так как $u = u\left(x_3\right)$, $v = v\left(x_3\right)$, то $w\left(x_3\right) = w\left(0\right) = w_0$.

Далее рассматривается случай не взаимодействующих между собой составляющих ЗВ, т.е. предполагается, что матрица оператора $\mathbf{B}$ имеет диагональный вид, в этом случае задача для системы (1) представляет собой n независимых начально-краевых задач относительно компонентов примеси $\varphi_i\left(\mathbf{x}, t\right)$, $i = \overline{1, n}$.

2. На практике встречаются случаи, когда источник загрязнений располагается на некоторой площади подстилающей поверхности и сам претерпевает изменения во времени, вызванные миграцией загрязнителя на уровне источника (например, разлив загрязняющих веществ на поверхности водоемов и др.), т.е. $f_{0i} = f_{0i}\left(x_1, x_2, t\right)$. В этом случае для решения основной задачи распространения примеси необходимо на каждом элементарном временном промежутке решать еще и вспомогательную задачу по нахождению функции источника, что увеличивает временной ресурс, затрачиваемый на решение задачи.

Так, например, распространение нефтяной плёнки по поверхности воды можно представить как суперпозицию двух условно независимых процессов: первый — дрейф плёнки, и второй — растекание плёнки по спокойной воде, приводящее к увеличению площади с течением времени [3]. Если пятно как целое переносится незначительно в силу слабости ветра или отсутствия течения, то в качестве уравнения, приближенно описывающего второй процесс, может быть выбрано уравнение анизотропной диффузии с учетом переноса и деградации

$$\frac{\partial f_{0i}}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{a_1} f_{0i}) + \sigma f_{0i} = \sum_{k=1}^{2} \frac{\partial}{\partial x_k} R_k \frac{\partial f_{0i}}{\partial x_k} + \tilde{f},$$

где $\mathbf{a}_1 = (u_1, v_1)$ — вектор скорости движения сплошной среды на уровне источника; R_k, $k = 1, 2$ — диффузионные характеристики, σ — коэффициент деградации выбрасываемой примеси, $\tilde{f}$ — функция, характеризующая источник первичного выброса.

При растекании загрязнителя на водной поверхности более легкие компоненты улетучиваются, а водорастворимые — выщелачиваются, причем улетучивание низкомолекулярных соединений происходит быстрее, чем растворение. Тяжелые компоненты оседают на дно и аккумулируются в донных отложениях, вязкость оставшегося на поверхности вещества повышается, процесс растекания постепенно прекращается. После окончания стадии активного растекания площадь пятна изменяется незначительно. В случае установившихся характеристик процесса компоненты вектора $\mathbf{a}_1 = (u_1, v_1)$ и коэффициенты R_k можно считать постоянными.

При этом для получения итоговой картины распространения примеси на уровне подстилающей поверхности источник первичного выброса будем полагать сосредоточенным, с мощностью, не зависящей от времени, т.е. $\tilde{f}(x_1, x_2) = C\delta(x_1 - x_0, x_2 - y_0)$. В этом случае переход к стационарной модели ускорит реализацию численного алгоритма решения основной задачи.

Считая рассматриваемую область подстилающей поверхности достаточно большой, введем декартову систему координат, исходя из предположения об отсутствии потока примеси от источника вдоль прямой $x_2 = 0$. Кроме того, положим, что примесь не достигает некоторой прямой $x_2 = l$ в плоскости источника. Введя указанные ограничения, получим следующую задачу:

$$u_1 \frac{\partial f_{0i}}{\partial x_1} + v_1 \frac{\partial f_{0i}}{\partial x_2} + \sigma f_{0i} = \\ = R_1 \frac{\partial^2 f_{0i}}{\partial x_1^2} + R_2 \frac{\partial^2 f_{0i}}{\partial x_2^2} + C\delta\left(x_0, y_0\right), \quad (4)$$

$$f_{0i}(x_1, l) = 0, \quad \frac{\partial f_{0i}\left(x_1, 0\right)}{\partial x_2} = 0,$$

Подход к решению такого рода задач изложен в [4, 5]. Применим к уравнению (4) интегральное преобразование Фурье по обеим переменным, считая, что $f_{0i}\left(x_1, x_2\right) = 0$ при $x_2 < 0$ и $x_2 > l$. Далее использованы обозначения

$$F_{0i}\left(\alpha_1, x_2\right) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} f_{0i}\left(x_1, x_2\right) e^{i\alpha_1 x_1} dx_1,$$

$$F\left(\alpha_1, \alpha_2\right) = \\ = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \int\limits_{0}^{l} f_{0i}\left(x_1, x_2\right) e^{i(\alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2)} dx_1 dx_2.$$

С учетом граничных условий

$$\int\limits_{0}^{l} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial f_{0i}\left(x_1, x_2\right)}{\partial x_2} e^{i(\alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2)} dx_1 dx_2 = \\ = -F_{0i}\left(\alpha_1, 0\right) - i\alpha_2 F\left(\alpha_1, \alpha_2\right),$$

$$R_2 \Bigg[\frac{\partial F_{0i}\left(\alpha_1, l\right)}{\partial x_2} e^{i\alpha_2 l} + \\ + i\alpha_2 F_{i0}\left(\alpha_1, 0\right) - \alpha_2^2 F\left(\alpha_1, \alpha_2\right) \Bigg] - \\ - v_1 \left[-F_{i0}\left(\alpha_1, 0\right) - i\alpha_1 F\left(\alpha_1, \alpha_2\right)\right] - \\ - \left(R_1 \alpha_1^2 - i\alpha_1 u_1 + \sigma\right) F\left(\alpha_1, \alpha_2\right) = \\ = -Ce^{i(\alpha_1 x_0 + \alpha_2 y_0)}.$$

Полученное соотношение можно записать в разрешенном относительно $F\left(\alpha_1, \alpha_2\right)$ виде

$$F\left(\alpha_1, \alpha_2\right) = \\ = \frac{D_1 e^{i\alpha_2 l} + \left(iR_2\alpha_2 + v_1\right) D_2 + C_0 e^{i\alpha_2 y_0}}{R_2 \alpha_2^2 - i\left(\alpha_1 u_1 + \alpha_2 v_1\right) + \sigma + R_1 \alpha_1^2} = \\ = \frac{D_1 e^{i\alpha_2 l} + \left(iR_2\alpha_2 + v_1\right) D_2 + C_0 e^{i\alpha_2 y_0}}{R_2\left(\alpha_2 - i\lambda_1\right)\left(\alpha_2 - i\lambda_2\right)},$$

где

$$D_1 = \frac{R_2 \partial F_{i0}\left(\alpha_1, l\right)}{\partial x_2}, \quad D_2 = F_{i0}\left(\alpha_1, 0\right),$$

$$C_0 = e^{i\alpha_1 x_0},$$

$$\lambda_{1,2} = \frac{v_1 \pm \sqrt{v_1^2 + 4R_2\left(R_1\alpha_1^2 - i\alpha_1 u_1 + \sigma\right)}}{2R_2}.$$

Так как $F\left(\alpha_1, \alpha_2\right)$ является целой функцией, то из приведенного выше представления

$$D_1 e^{i\lambda_j l} + \left(iR_2\lambda_j + v_1\right) D_2 + C_0 e^{i\lambda_j y_0} = 0, \quad (5)$$

$$j = 1, 2.$$

Решив систему (5) и применив обратное преобразование Фурье по α_2, получим

$$F_{0i}\left(\alpha_1, x_2\right) = \\ = \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Bigg[R_2 \left(\lambda_2 e^{-\lambda_2 y_0} - \lambda_1 e^{-\lambda_1 y_0}\right) e^{i\alpha_2 l} + \\ + \left(iR_2\eta\alpha_2 + v_1\right) C_0 \left(e^{-\lambda_1 y_0 - \lambda_2 l} - e^{-\lambda_2 y_0 - \lambda_1 l}\right) - \\ - R_2 e^{i\alpha_2 y_0} C_0 \left(\lambda_2 e^{-\lambda_2 l} - \lambda_1 e^{-\lambda_1 l}\right) \Bigg] \times \\ \times \frac{e^{-i\alpha_2 x_2} d\alpha_2}{R_2\left(\alpha_2 - i\lambda_1\right)\left(\alpha_2 - i\lambda_2\right)\Delta\left(\lambda_1, \lambda_2\right)},$$

$$\Delta = -\lambda_1\lambda_2 \left(e^{\lambda_1 y_0} - e^{\lambda_2 y_0}\right) \times \\ \times \left(e^{\lambda_1(y_0 - l)} - e^{\lambda_2(y_0 - l)}\right) + \\ + \left(\lambda_2 e^{\lambda_1 y_0} - \lambda_1 e^{\lambda_2 y_0}\right) \times \\ \times \left(\lambda_1 e^{\lambda_1(y_0 - l)} - \lambda_2 e^{\lambda_2(y_0 - l)}\right).$$

Интеграл может быть вычислен с помощью теории вычетов [6]. Проведя соответствующие преобразования, получим выражения для

интегральной характеристики концентрации примеси на уровне источника

$$F_{0i} = \left\{Ce^{i\alpha_1 x_0} e^{k_1(x_2-y_0)} \operatorname{sh}[k_2(l-y_0)]\times \right.$$
$$\left. \times \left[k_1 \operatorname{sh}(k_2 x_2) - k_2 \operatorname{ch}(k_2 x_2)\right]\right\}\times$$
$$\times \left\{R_2 k_2 [k_1 \operatorname{sh}(k_2 l) - k_2 \operatorname{ch}(k_2 l)]\right\}^{-1}$$
$$\text{при } x_2 \leqslant y_0;$$

$$F_{0i} = \left\{Ce^{i\alpha_1 x_0} e^{k_1(x_2-y_0)} \operatorname{sh}[k_2(l-x_2)]\times \right.$$
$$\left. \times \left[k_1 \operatorname{sh}(k_2 y_0) - k_2 \operatorname{ch}(k_2 y_0)\right]\right\}\times$$
$$\times \left\{R_2 k_2 [k_1 \operatorname{sh}(k_2 l) - k_2 \operatorname{ch}(k_2 l)]\right\}$$
$$\text{при } x_2 > y_0. \quad (6)$$

Здесь введены обозначения

$$k_1 = \frac{v_1}{2R_2},$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{v_1^2 + 4R_2\left(R_1\alpha_1^2 - i\alpha_1 u_1 + \sigma\right)}}{2R_2}.$$

Концентрация ЗВ на уровне источника может быть определена путем применения к соотношениям (6) обращения Фурье

$$f_{0i}\left(x_1, x_2\right) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} F_{0i}\left(\alpha_1, x_2\right) e^{-i\alpha_1 x_1} d\alpha_1.$$

Обращение преобразования Фурье производится численно.

3. Используя метод расщепления по процессам и двуциклический метод расщепления, основанный на схеме Кранка-Николсона [7, 8], решение динамической задачи (1) распространения загрязняющих веществ в атмосфере с условием (3) на подстилающей поверхности строится численно для каждой составляющей примеси $\varphi_i\left(\mathbf{x}, t\right)$. Далее индекс i опущен.

На первом этапе рассматривается перенос примеси. Разностная схема, аппроксимирующая перенос примеси по траекториям, имеет следующий вид:

$$\left(E + \frac{\Delta t}{4}\Lambda_\alpha\right)\varphi^{j-\frac{4-\alpha}{4}} =$$
$$= \left(E - \frac{\Delta t}{4}\Lambda_\alpha\right)\varphi^{j-\frac{5-\alpha}{4}},$$
$$\alpha = 1, 2, 3,$$

$$\left(E + \frac{\Delta t}{4}\Lambda_{5-\alpha}\right)\varphi^{j+\frac{\alpha}{4}} =$$
$$= \left(E - \frac{\Delta t}{4}\Lambda_{5-\alpha}\right)\varphi^{j+\frac{\alpha-1}{4}},$$
$$\alpha = 2, 3, 4.$$

где

$$\left(\Lambda_1\varphi\right)_{k,l,m} = \left[u_{k+1/2,l,m}\varphi_{k+1,l,m} - \right.$$
$$\left. - u_{k-1/2,l,m}\varphi_{k-1,l,m}\right]\left(2h_1\right)^{-1},$$

$$\left(\Lambda_2\varphi\right)_{k,l,m} = \left[v_{k,l+1/2,m}\varphi_{k,l+1,m} - \right.$$
$$\left. - v_{k,l-1/2,m}\varphi_{k,l-1,m}\right]\left(2h_2\right)^{-1},$$

$$\left(\Lambda_3\varphi\right)_{k,l,m} = \left[\left(w - w_g\right)_{k,l,m+1/2}\varphi_{k,l,m+1} - \right.$$
$$\left. - \left(w - w_g\right)_{k,l,m-1/2}\varphi_{k,l,m-1}\right]\left(2h_3\right)^{-1}.$$

E — единичный оператор, h_i $(i = \overline{1,3})$ — величина шага сетки по соответствующей оси.

На втором этапе, используя аналогичную схему, аппроксимируется турбулентная диффузия примеси. В этом случае

$$\left(\Lambda_1\varphi\right)_{k,l,m} =$$
$$= \left[-K^1_{k+1,l,m}\varphi_{k+1,l,m} - K^1_{k,l,m}\varphi_{k-1,l,m} + \right.$$
$$\left. + \left(K^1_{k,l,m} + K^1_{k+1,l,m}\right)\varphi_{k,l,m}\right]h_1^{-2},$$

$$\left(\Lambda_2\varphi\right)_{k,l,m} =$$
$$\left[-K^2_{k,l+1,m}\varphi_{k,l+1,m} - K^2_{k,l-1,m}\varphi_{k,l-1,m} + \right.$$
$$\left. + \left(K^2_{k,l,m} + K^2_{k,l+1,m}\right)\varphi_{k,l,m}\right]h_2^{-2},$$

$$\left(\Lambda_3\varphi\right)_{k,l,m} =$$
$$= \left[-K^3_{k,l,m+1}\varphi_{k,l,m+1} - K^3_{k,l,m-1}\varphi_{k,l,m-1} + \right.$$
$$\left. + \left(K^3_{k,l,m} + K^3_{k,l,m+1}\right)\varphi_{k,l,m}\right]h_3^{-2}.$$

На третьем этапе рассматривается трансформация примеси

$$\varphi^{j+1} = \varphi^j + \frac{\Delta t}{2}\left[-\sigma\varphi^j - \sigma\left(\varphi^j - \Delta t\sigma\varphi^j\right)\right]. \quad (7)$$

Если изменение компонентов примеси связано не просто с разложением их на атмосферные составляющие, но и с реакциями между собой (допустимы одно-молекулярные реакции), оператор трансформации $\mathbf{B}$ описывается недиагональной матрицей, и на этом

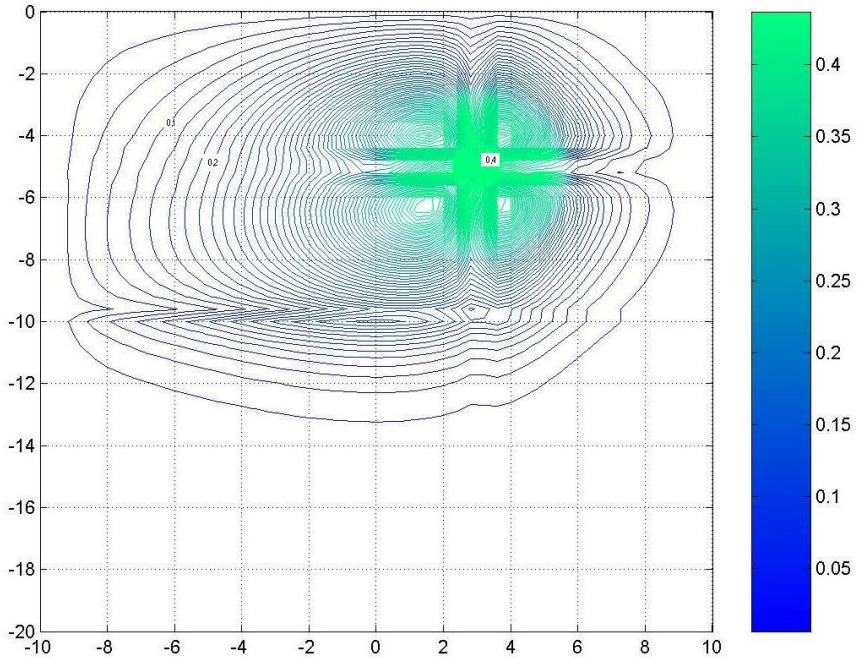

Рис. 1. Распределение концентраций примеси на высоте $x_3 = 0,4$

этапе в каждой точке сетки вместо (7) приходим к системе обыкновенных дифференциальных уравнений, решаемой методом Рунге-Кутта второго порядка. В этом случае реализуется следующая численная схема:

$$\varphi^{j+1} = \varphi^j + \frac{\Delta t}{2}\left[-\mathbf{B}\varphi^j - \mathbf{B}\left(\varphi^j - \Delta t\mathbf{B}\varphi^j\right)\right].$$

Здесь φ^j — значение вектора концентраций, полученное на предыдущем этапе.

Таким образом, реализована общая схема второго порядка аппроксимации по временной и пространственным переменным, которая является абсолютно устойчивой.

На базе представленной математической модели проведены численные расчеты для различных характеристик поверхностного источника. На рис. 1 приведены результаты расчетов концентрации ЗВ над источником при этом, на уровне источника $R_1 = R_2 = 2,0$, $u_1 = -3,0$, $v_1 = -1,0$, $w_0 = 0$, источник первичного выброса располагается на подстилающей поверхности в точке с координатами (3,4) и имеет мощность 100, в области расчет ветровых характеристик производится на основе данных о геострофической скорости ветра и $U_g = -5,0$, $V_g = -5,0$, коэффициенты диффузии $K_1 = K_2 = 1,0$, $K_3 = 0,1$).

На рис. 2 представлены линии уровня концентрации примеси на уровне источника первичного выброса при указанных его характеристиках.

Предложенный подход объединяет различные методы решения задач миграции примесей. Использование аналитических представлений интегральной характеристики концентрации примеси на уровне источника позволяет ускорить вычислительный процесс решения динамической задачи, дискретные аппроксимации и схема вычислительного алгоритма которой построены на основе метода расщепления. Полученные результаты позволяют оценить уровень концентрации примеси от площадного источника, количественно и качественно оценить возможные последствия загрязнения атмосферы.

Литература

1. *Марчук Г. И.* Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982. 315 с.
2. *Алоян А. Е.* Моделирование динамики и кинетики газовых примесей и аэрозолей в атмосфере. М.: Наука, 2007. 340 с.
3. *Монин А. С., Красицкий В. П.* Явления на поверхности океана. Л.: Гидрометеоиздат, 1985. 376 с.
4. *Бабешко В. А. Гладской И. Б., Кособуцкая Е. В., Зарецкая М. В.* К проблеме оценки выбросов загрязняющих веществ источниками

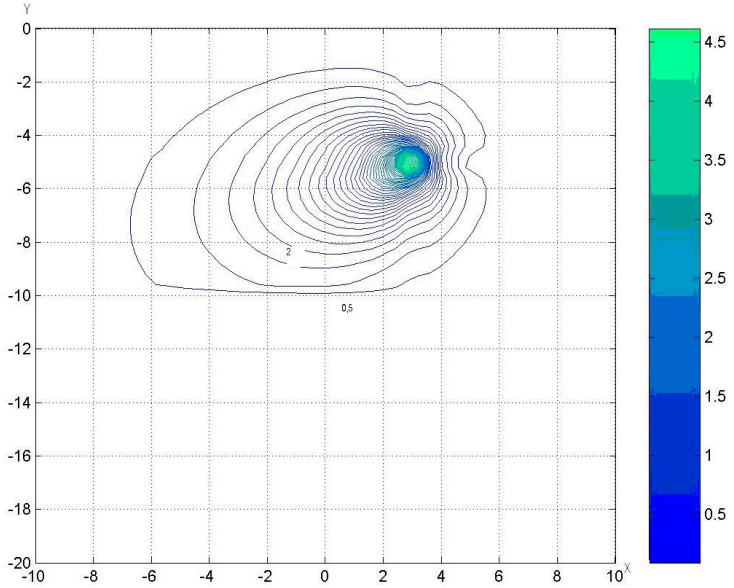

Рис. 2. Распределение концентраций примеси на уровне источника

различных типов // ДАН. 1995. Т. 342. № 6. С. 835–838.

5. *Бабешко В. А., Бабешко О. М.* Интегральные преобразования и метод факторизации в краевых задачах // ДАН. 2005. Т. 403. № 6. С. 26–28.
6. *Лаврентьев М. А., Шабат Б. В.* Методы теории функций комплексного переменного. М.: Наука, 1987. 688 с.
7. *Бабешко В. А., Павлова А. В., Цыбульников А. А., Ломакина Л. В.* Расчет осаждения субстанций на разнотипные подстилающие поверхности: Свидетельство об офиц. регистрации программы для ЭВМ (Россия). № 2008611548; от 26.03.2008.
8. *Павлова А. В., Цыбульников А. А.* Решение сопряженных задач при изучении динамики и последствий загрязнения атмосферы // Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. 2005. Приложение № 1. С. 70–74.

Ключевые слова: диффузия, перенос, метод интегральных преобразований, метод расщепления.

Статья поступила 24 мая 2008 г.
Кубанский государственный университет, г. Краснодар