

УДК 519.6+004.9:504.064

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА РАСПРОСТРАНЕНИЯ ВРЕДНЫХ ВЕЩЕСТВ В АТМОСФЕРЕ С УЧЕТОМ ТЕМПЕРАТУРЫ, ФИЗИЧЕСКИХ И ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ

Равшанов Н.<sup>1</sup>, Набиева И.С.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Научно-исследовательский институт развития цифровых технологий и искусственного интеллекта, Ташкент, Узбекистан  
ravshanzade-09@mail.ru, irodamubina777@gmail.com

**Аннотация.** В данной статье рассматривается математическая модель для анализа и прогнозирования распространения токсичных веществ в пограничном слое атмосферы. Модель учитывает скорость перемещения частиц в воздушной среде, а также коэффициенты горизонтальной и вертикальной диффузии, зависящие от температуры окружающей среды, скорости переноса и диаметра частиц. На основе заданной математической модели были проведены эксперименты на ЭВМ.

**Ключевые слова:** математическая модель, вредные вещества, перенос и диффузия, температура, скорость ветра по трем направлениям, атмосфера.

### I. ВВЕДЕНИЕ

Загрязнение атмосферы – одна из важнейших тем экологической науки, поскольку вредные вещества могут существенно влиять как на здоровье человека, так и на состояние окружающей среды. Распределение загрязняющих веществ часто определяется процессами диффузии, скорость диффузии зависит от множества факторов, включая температуру атмосферы, диаметр частиц, а также физические и химические свойства самих веществ. Понимание того, как эти факторы влияют на динамику распространения загрязняющих веществ, может дать рекомендации для управления качеством воздуха, моделей изменения климата и политики в области общественного здравоохранения.

В ряде исследований было установлено, что повышение температуры приводит к увеличению скорости диффузии газов и твердых частиц. Например, исследование [1-3] показало, что при повышении температуры окружающей среды с 25 до 40 °С коэффициент диффузии твердых частиц увеличивается на 15 %, что подтверждает идею о том, что кинетическая энергия, вызванная температурой, усиливает движение частиц. Аналогичным образом в работе [4] было обнаружено, что градиент концентрации вредных газов (таких как NO<sub>2</sub> или SO<sub>2</sub>) быстрее уменьшается в более теплых атмосферных условиях, что свидетельствует о более высокой скорости диффузии.

Как отмечено в работе [5], основные загрязнители, концентрации которых измеряются на стационарных постах наблюдения: оксид азота

(NO), диоксид азота (NO<sub>2</sub>), диоксид серы (SO<sub>2</sub>), оксид углерода (CO), взвешенные частицы (пыль), а также аммиак (NH<sub>3</sub>), озон (O<sub>3</sub>). Взвешенные частицы (пыль) – широко распространенный загрязнитель атмосферного воздуха, включающий смесь твердых и жидких частиц, находящихся во взвешенном состоянии. Взвешенные частицы включают в себя мелкодисперсные частицы PM<sub>10</sub> и PM<sub>2,5</sub>. Мелкодисперсные частицы PM<sub>10</sub> и PM<sub>2,5</sub> – твердые микрочастицы размером менее 10 мкм – PM<sub>10</sub> и менее 2,5 мкм – это PM<sub>2,5</sub>, находящиеся в воздухе во взвешенном состоянии, которые образуются в результате строительства, производства (особенно цемента, керамики, кирпича и др.), эрозия дорожного покрытия и стирания тормозных колодок и шин, сжигания твердых видов топлива (уголь, нефть).

Проведя исследование и анализ выбросов дымовых газов с высокой влажностью на отечественных и зарубежных угольных электростанциях, авторы считают, что значительное увеличение относительной влажности и большое количество субмикронных частиц, выбрасываемых из-за выбросов дымовых газов с высокой влажностью в нижние слои атмосферы, могут способствовать образованию постоянного смога, поэтому количественное исследование вклада высокой влажности в образовании смога является следующим направлением исследований выбросов дымовых газов с высокой влажностью [6]. Высокая влажность неблагоприятна для диффузии загрязняющих веществ. Это приведет к вторичной трансформации

ции атмосферных загрязнителей, будет способствовать активации аэрозолей и поглощению влаги, а также повлияет на видимость в атмосфере. Высокая влажность является одним из важных условий, вызывающих устойчивый смог.

Помимо времени жизни в атмосфере, аэрозоли также обладают высокой удельной площадью и способствуют адсорбции, поглощению и реакциям (окислениям) газообразных веществ, присутствующих в воздухе. Список типичных скоростей осаждения и площадей поверхности атмосферных дисперсоидов приведен в [2]. Для изучения диффузии вредных веществ в атмосфере можно использовать различные методы, от теоретических моделей до экспериментальных подходов. Законы Фика представляют собой фундаментальную основу для понимания процесса диффузии. Первый закон гласит, что поток частиц пропорционален градиенту концентрации и обратно пропорционален коэффициенту диффузии [7]. Второй закон описывает эволюцию концентрации частиц во времени, учитывая изменения концентрации во времени и пространстве. Эти законы применимы к диффузии газообразных молекул или твердых частиц в атмосфере, но должны быть адаптированы к изменениям температуры и диаметра частиц. Статья сосредоточена на принципах теории диффузии, такие как законы диффузии Фика, где учитываются температура и размер частиц.

В работе [8] коэффициент диффузии  $D$ , является функцией температуры. С повышением температуры кинетическая энергия молекул или частиц увеличивается, что приводит к увеличению скорости диффузии. Эта зависимость может быть описана уравнением Аррениуса, которое связывает коэффициент диффузии с температурой.

В статье Стивена Лоуэра [8] рассматривается температура, её влияние на скорость диффузии, которая изменяет динамику энергии частиц или молекул в атмосфере. С увеличением размера частиц скорость диффузии снижается из-за увеличения сопротивления движению, вызванного увеличением площади поверхности и взаимодействием с молекулами воздуха. Это соотношение имеет решающее значение при рассмотрении рассеивания в атмосфере твердых загрязняющих веществ, таких как аэрозоли или твердые частицы.

В работе [9] рассматривалась разработка математической модели процесса рассеяния аэрозольных частиц в слое атмосферы у земной поверхности. Представленная математическая

модель служит для решения задач мониторинга и прогнозирования экологического состояния окружающей среды промышленных территорий. С целью проверки адекватности разработанного математического аппарата в ЭВМ был проведен расчетный эксперимент, результаты которого сопоставлены с реальными данными реального производственного объекта, расположенного в Бухарской области Узбекистана.

В работе [10] была разработана компьютерная модель для мониторинга и прогнозирования распределения и диффузии аэрозольных частиц в нижнем слое атмосферы автотранспортом. Для ее реализации использовался структурный алгоритм, разработанный на основе метода интеграции модели в вычислительные системы.

В работе [11] представлена математическая модель динамики многокомпонентной воздушной среды, которая описывает перенос загрязняющих веществ и тепла, фазовые переходы на распространение вредных примесей в атмосфере. В рамках исследования разработаны параллельные алгоритмы для решения данной модели, которые реализованы в программном обеспечении для высокопроизводительных вычислительных систем.

В статье [12] представлен обзор моделирования загрязнения воздуха в уличных каньонах с акцентом на взаимосвязь динамики и химии. Что касается динамики, то метод вычислительной гидродинамики стал мощным численным инструментом, включающим в основном модели RANS и LES. Модели Навье-Стокса с усреднением по Рейнольдсу по своей природе являются стационарной методологией, в то время как модели Large-Eddy Simulation способны справиться с нестационарностью и прерывистостью потока в каньоне и получить переходные структуры турбулентности в уличных каньонах.

Статья [13] посвящена рассмотрению процесса перемещения и распространения вредных веществ в атмосфере с учетом различных погодных условий и внешних изменений. Анализировались миграция загрязняющих веществ от источников, их перемещение за счет среднего потока воздуха (адвекция), влияние атмосферной турбулентности на их рассеивание и процессы массовой диффузии.

В работе [14] представлена математическая модель прогнозирования метеорологических параметров, учитывающая вертикальную турбулентную диффузию, процессы теплопереноса и фазовых переходов. Автором сформулирована и решена теоретическая задача

гидротермодинамики и теплообмена многофазных сред, принимая во внимание их взаимодействие с подстилающей поверхностью. Также разработаны методики для учета незакрепленного верхнего слоя атмосферы, расчета переноса и рассеивания вредных веществ в пограничных и приземных слоях атмосферы, а также взаимодействия деятельного слоя почвы с воздушными массами.

В работе [14] рассматриваются экспериментальные и количественные результаты исследования процессов загрязнения атмосферы в промышленных районах. Предложенная математическая модель помогает решать задачи мониторинга и прогнозирования экологического

состояния окружающей среды в промышленных зонах, а также способствует принятию решений по защите от негативного воздействия техногенных факторов.

## II. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

На основании изложенного рассмотрим математическую модель, описывающую закон гидромеханики, с учетом важных параметров для изучения переноса и диффузии аэрозольных частиц в атмосфере – состава скоростей ветра по трём направлениям:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial t} + u \frac{\partial \theta}{\partial x} + v \frac{\partial \theta}{\partial y} + (w - w_g) \frac{\partial \theta}{\partial z} + (\sigma + \alpha) \theta = \\ = D_x (T, |u|, d_p) \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + D_y (T, |v|, d_p) \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} + D_z (T, (w - w_g), d_p) \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} + \delta Q, \end{aligned} \quad (1)$$

с соответствующими начальными и граничными условиями:

$$\theta|_{t=0} = \theta^0; \quad (2)$$

$$-D_x \left. \frac{\partial \theta}{\partial x} \right|_{x=0} = \xi (\theta_E - \theta), \quad (3)$$

$$D_x \left. \frac{\partial \theta}{\partial x} \right|_{x=L_x} = \xi (\theta_E - \theta);$$

$$-D_y \left. \frac{\partial \theta}{\partial y} \right|_{y=0} = \xi (\theta_E - \theta), \quad (4)$$

$$D_y \left. \frac{\partial \theta}{\partial y} \right|_{y=L_y} = \xi (\theta_E - \theta);$$

$$-D_z \left. \frac{\partial \theta}{\partial z} \right|_{z=0} = \xi (\beta \theta - f_0), \quad (5)$$

$$D_z \left. \frac{\partial \theta}{\partial z} \right|_{z=H_z} = \xi (\theta_E - \theta).$$

Здесь,  $\theta$  – концентрация вредных веществ в атмосфере;  $t$  – время;  $u, v, w$  – скорость ветра по трем направлениям;  $w_g$  – скорость осаждение частиц;  $x, y, z$  – система координат;  $\sigma$  – коэффициент поглощения вредных веществ в атмосфере;  $\alpha$  – коэффициент, характеризующий захват частиц элементами растительности;  $\delta$  – функция Дирака;  $Q$  – мощность источника;  $D_x, D_y, D_z$  – коэффициенты диффузии;  $T$  – температура;  $d_p$  – диаметр частицы;  $\beta$  – коэффициент взаимодействия частиц с подстилающей поверхностью;  $\theta_E$  – концентрация, поступающая через границы рассматриваемой области;  $f_0$  – стационарный источник выброса вредных веществ с

подстилающей поверхности земли;  $\xi$  – безразмерный параметр.

Чтобы обеспечить адекватность математической модели, необходимо правильно подобрать параметры и коэффициенты в модели в соответствии с процессом. По этой причине в каждом временном слое был введен расчет коэффициента диффузии в зависимости от составляющих напряжений по отношению ко всему пространству, температуры и размера частицы.

В атмосфере диффузия играет важную роль в процессе переноса и рассеивания вредных веществ, а также в формировании метеорологических явлений.

В указанной модели (1-5) при процессе переноса частиц диффузионный член рассматриваются как переменные. Он изменяется во времени в зависимости от физических характеристик. Диффузия представлена как функция, зависящая от температуры, скорости ветра и диаметра частицы. Для расчета коэффициентов диффузии по направлениям использованы следующие формулы. В соответствии с физическими законами эти зависимости имеют следующий вид:

$$D_x = D_m \left( 1 + a \frac{|u|}{d_p} \right); \quad (6)$$

$$D_y = D_m \left( 1 + a \frac{|v|}{d_p} \right); \quad (7)$$

$$D_z = D_m \left( 1 + a \frac{(w - w_g)}{d_p} \right); \quad (8)$$

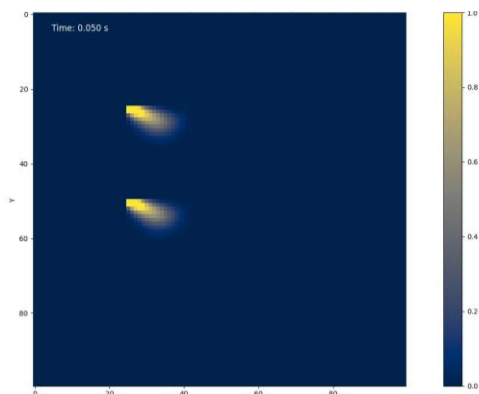
$$D_m = \frac{k_B T}{6\pi\eta d_p}; \quad (9)$$

$$\eta(T) = \eta_0 \left( \frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \left( \frac{T_0 + S}{T + S} \right). \quad (10)$$

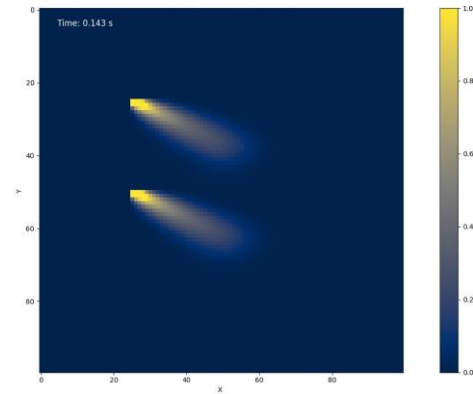
Здесь,  $k_B$  - постоянная Больцмана,  $\eta$  - кинематическая вязкость,  $D_m$  - коэффициент молекулярной диффузии,  $a$  - безразмерный коэффициент, представляющий адвективный эффект,  $\eta_0$  и  $T_0$  - вязкость и температура,  $S$  - константа Sutherland для газа - фиксированное число.

### III. АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ

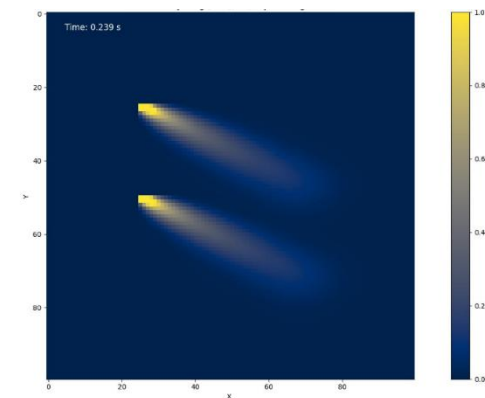
На основе приведённой выше модели, были проведены численные расчеты, результаты которых представлены на рисунках (1-5). В расчетах были использованы два источника: на высоте  $H_1 = 20$  м и  $H_2 = 40$  м. В данном случае диффузионный член рассматривается как функция. Анализ был проведен для различных временных интервалов. Были проведены эксперименты при одинаковых значениях:  $Q = 1000$  мг/м<sup>3</sup>,  $k_B = 1.38e-23$  Дж/К,  $d_p = 1.1e-5$  м,  $T = 25^\circ\text{C}$ . На рисунках 1-3 приведено состояние диффузии при  $u = 2$  м/с,  $v = 1$  м/с,  $w = 0.01$  м/с и при времени  $t = 0.050$  ч,  $t = 0.143$  ч,  $t = 0.239$  ч. На рисунках 4-5 диффузионный процесс представлен при  $u = 3$  м/с,  $v = 3$  м/с,  $w = 0.01$  м/с, при времени  $t = 0.042$  ч и  $t = 0.184$  ч. В первом рисунке (время  $t = 0,050$  часа), во втором (время  $t = 0,143$  часа) и в третьем (время  $t = 0,239$  часа) показано распространение вредных веществ в зависимости от времени. Используя два источника, были получены различные результаты с учётом скоростей ветра и температуры.



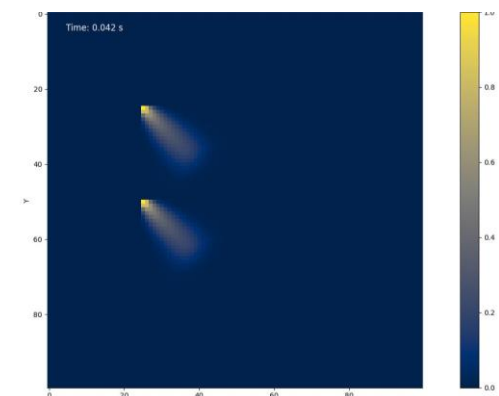
**Рис. 1.** Динамика переноса и диффузии аэрозольных частиц в атмосфере при  $H_1 = 20$  м,  $H_2 = 40$  м,  $u = 2$  м/с,  $v = 1$  м/с,  $w = 0.01$  м/с,  $t = 0.050$ ч



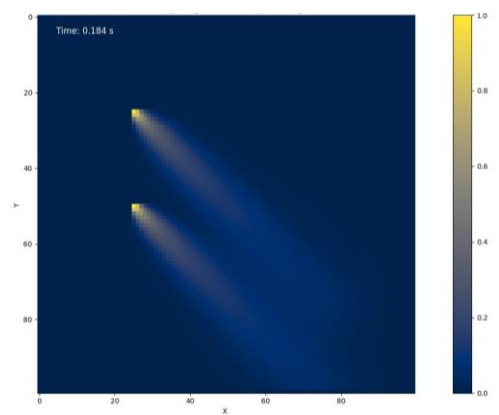
**Рис. 2.** Динамика переноса и диффузии аэрозольных частиц в атмосфере при  $H_1 = 20$  м,  $H_2 = 40$  м,  $u = 2$  м/с,  $v = 1$  м/с,  $w = 0.01$  м/с,  $t = 0.143$ ч



**Рис. 3.** Динамика переноса и диффузии аэрозольных частиц в атмосфере при  $H_1 = 20$  м,  $H_2 = 40$  м,  $u = 2$  м/с,  $v = 1$  м/с,  $w = 0.01$  м/с,  $t = 0.239$ ч



**Рис. 4.** Динамика переноса и диффузии аэрозольных частиц в атмосфере при  $H_1 = 20$  м,  $H_2 = 40$  м,  $u = 3$  м/с,  $v = 3$  м/с,  $w = 0.01$  м/с,  $t = 0.042$ ч



**Рис. 5.** Динамика переноса и диффузии аэрозольных частиц в атмосфере при  $H_1 = 20$  м,  $H_2 = 40$  м,  $u = 3$  м/с,  $v = 3$  м/с,  $w = 0.01$  м/с,  $t = 0.184$ ч

Условия для первого набора графиков: скорость ветра  $u = 2$  м/с,  $v = 1$  м/с,  $w = 0,01$  м/с. В четвертом рисунке (время  $t = 0,042$  часа) и пятом (время  $t = 0,184$  часа) показаны изменения при других условиях: скорость ветра  $u = 3$  м/с,  $v = 3$  м/с,  $w = 0,01$  м/с. Скорости ветра учитывались индивидуально для каждого случая, что обеспечивало более точные и специфичные результаты.

Из полученных результатов видно, что с увеличением скорости ветра процесс распространения вредных веществ ускоряется, а с течением времени вредные вещества охватывают все более широкую территорию.

#### IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анализ проведенных численных расчетов и полученных результатов показал, что разработанная математическая модель переноса загрязняющих веществ в приземном слое атмосферы основывается на учете скоростей ветра в трех направлениях, а также на процессе переноса загрязняющих веществ. Для повышения точности расчетов использовалась постоянная Больцмана, что позволило уменьшить диаметр частиц. Коэффициент диффузии рассчитывается на основе заданных значений при определенном временном интервале, и при высокой скорости ветра процесс диффузии ускоряется, что приводит к распространению вредных веществ на большем расстоянии.

#### ЛИТЕРАТУРА

[1] *Saurabh Sonwani, Ankit Yadavb and Pallavi Saxena.* Atmospheric Brown Carbon: A Global Emerging Concern for Climate and Environmental Health // *Management of Contaminants of Emerging Concern (CEC)*

- in Environment. doi.org/10.1016/B978-0-12-822263-8.00008-7. P. 225-238.(2021)
- [2] *Kalliat T. Valsaraj, Franz S. Ehrenhauser, Aubrey A. Heath, Mickael Vaitilingom.* Mass Transport and Chemistry at the Air–Water Interface of Atmospheric Dispersoids // *Food, Energy, and Water* doi.org/10.1016/B978-0-12-800211-7.00003-X p.93-109
- [3] *Djikaev Yuri S., Eli Ruckenstein.* Formation and evolution of aqueous organic aerosols via concurrent condensation and chemical aging // *Advances in Colloid and Interface Science*, Volume 265, March 2019, Pages 45-67
- [4] *Liu Y. et al.* Mitigating air pollution strategies based on solar chimneys. // *Solar Energy* 218 (2021) 11–27
- [5] <https://monitoring.meteo.uz/ru/> Основные загрязнители атмосферного воздуха. 2024г.
- [6] *Shuangchen M. et al.* Environmental influence and countermeasures for high humidity flue gas discharging from power plants. // *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 73 (2017) 225–235
- [7] *Лобанов М. Л., Зорина М. А.* Методы определения коэффициентов диффузии. Екатеринбург Издательство Уральского университета 2017. УДК 539.219.3-047.37(075.8)
- [8] Arrhenius Equation is shared under a CC BY license and was authored, remixed, and/or curated by Stephen Lower Simon, Fraser University via source content that was edited to the style and standards of the LibreTexts platform.
- [9] *Равианов Н., Назаров Ш., Боборахимов Б.* Modeling transfer and diffusion process of aerosol particles in the atmosphere taking into account the capture of particles by plant elements // *IEEE Int. Conf. Inf. Sci. Commun. Technol.* 2022. P. 1–5.
- [10] *Kordzadze A.* Air, Water and Soil Quality Modelling for Risk and Impact Assessment // *Math. Model. Dyn. Ecol. Process. Syst. Sea-land-atmosph.* 2007. P. 181–193.
- [11] *Сухинов А.И.* Математическая модель распространения примеси в приземном слое атмосферы и ее программная реализация на многопроцессорной вычислительной системе / А.И. Сухинов, Д.С. Хачунц, А.Е. Чистяков // *Вестник УГАТУ.* – 2015. – Т. 19, № 1(67). – С. 213–223.
- [12] *Jian Zhong, Xiao-Ming Cai, William James Bloss.* Coupling dynamics and chemistry in the air pollution modelling of street

- canyons: A review // *Environmental Pollution*. Volume 214, July 2016, Pages 690-704, doi: org/10.1016/j.envpol.2016.04.052
- [13] *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. – pp. 357-394.
- [14] *Заурбеков Н.С.* Математическое моделирование антропогенной нагрузки атмосферного воздуха промышленных регионов при реальных климатических условиях: Дис. докт. техн. наук. – Тараз, 2009. – 234 с.
- [15] *Равшанов Н., Набиева И. С., Насруллаев П. А.* Современное состояние и перспективы развития цифровых технологий и искусственного интеллекта // УДК 519.6+519.7:004.8. Бухара, 27-28 сентября 2024 г.

Поступила в редакцию 12.09.2024

**Цитирование:** *Равшанов Н., Набиева И.С.* (2024). Математическое моделирование процесса распространения вредных веществ в атмосфере с учетом температуры, физических и химических свойств. *Международный Журнал Теоретических и Прикладных Вопросов Цифровых Технологий*, 7(4), –С. 27-32. <https://doi.org/10.62132/ijdt.v7i4.216>

## MATHEMATICAL MODELING OF THE PROCESS OF DISTRIBUTION OF HARMFUL SUBSTANCES IN THE ATMOSPHERE TAKING INTO ACCOUNT TEMPERATURE, PHYSICAL AND CHEMICAL PROPERTIES

*Ravshanov N.<sup>1</sup>, Nabieva I.S.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup> Digital Technologies and Artificial Intelligence Research Institute,  
Tashkent, Uzbekistan  
[ravshanzade-09@mail.ru](mailto:ravshanzade-09@mail.ru), [irodamubina777@gmail.com](mailto:irodamubina777@gmail.com)

**Abstract.** *This article presents a mathematical model for analyzing and predicting the dispersion of toxic substances in the atmospheric boundary layer. The model takes into account the particle transport velocities in the air medium, as well as the coefficients of horizontal and vertical diffusion, which depend on the ambient temperature, transport speed, and particle diameter. Based on the proposed mathematical model, computer simulations were conducted.*

**Keywords:** *mathematical model, harmful substances, conveyance and diffusion, temperature, wind speed in three directions, atmosphere.*